



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA  
SUPERIOR INGENIEROS  
INDUSTRIALES VALENCIA

TRABAJO FIN DE MASTER EN INGENIERÍA INDUSTRIAL

# APLICACIÓN DEL MODELADO CFD PARA LA CUANTIFICACIÓN DE LA PRODUCCIÓN DE HOLLÍN EN MOTORES DE ENCENDIDO POR COMPRESIÓN

AUTOR: GABRIEL FRANCISCO LUPINI GONZÁLEZ

TUTOR: JOSE MARÍA GARCÍA OLIVER

Curso Académico: 2018-19



A mi familia

A mis compañeros de la UPV

A J.M García Oliver y L. Pachano por su paciencia y ayuda

# RESUMEN

El proyecto presentado a continuación, consiste en la comprobación de la validez de diferentes modelos de producción de hollín integrados dentro de métodos de CFD, siendo estos modelos empíricos y fenomenológicos. La clase de procesos en los que se ha estudiado su capacidad de cuantificación, es en la combustión de sprays de combustible en condiciones características de motores de encendido por compresión, de los cuales se cuenta con una amplia base de datos experimental procedente de la *Engine Combustion Network*. Inicialmente, se hace un repaso de los fundamentos teóricos de los fenómenos que tienen lugar en dichos procesos, y de los modelos usados para su simulación, con especial atención a los referidos al hollín. Posteriormente, se hace una explicación de la selección de dichos modelos con el software utilizado para la realización de las simulaciones de los procesos. También, se describen los métodos usados para el post-procesado de los datos, y cuáles son los datos obtenidos de los mismos. Dichos datos calculados se representan convenientemente, y se analizan los resultados obtenidos, haciendo comparativas entre los distintos modelos utilizados y los datos obtenidos a partir de ensayos experimentales. Una vez realizados estos análisis, se llegan a conclusiones en cuanto a la capacidad predictiva de los modelos con los cambios en las condiciones de la simulación, y la utilidad que tienen los mismos.

**Palabras clave:** combustión, hollín, CFD, empírico, fenomenológico.

# ABSTRACT

The following project, consists on the validation of different soot production models integrated in CFD methods, being these models empirical and phenomenological. The kind of processes in which their quantification capacity is studied, is the combustion of fuel sprays in compression ignited engines conditions, of which there is a comprehensive experimental database from the *Engine Combustion Network*. Initially, a review of the theoretical basis of the phenomena that take place in these processes is done, and also of the models used for their simulation, with special attention on the ones related to soot. Later, there is an explanation about how these models are selected in the software used for the simulations. Also, the methods used for data post-processing are described, as well as which data are obtained from it. These calculated data are conveniently represented and the obtained results are analyzed, doing comparisons between the different models and the data obtained from experimental tests. Once these analyses are done, conclusions are reached regarding the predictive capacity of the models with changes in the simulation's conditions, and the usefulness of them.

**Key words:** combustion, soot, CFD, empirical, phenomenological.



## TABLA DE CONTENIDOS

### DOCUMENTO I. MEMORIA

<b>Capítulo 1 Introducción y planteamiento.....</b>	<b>3</b>
1.1 Introducción.....	4
1.2 Antecedentes.....	5
1.3 Objetivo del proyecto .....	7
1.4 Justificación .....	8
1.5 Motivación.....	9
1.6 Viabilidad.....	10
1.7 Estructura del trabajo .....	11
<b>Capítulo 2 Fundamentos teóricos y de modelado.....</b>	<b>12</b>
2.1 Introducción.....	13
2.2 Fundamentos de mecánica de fluidos.....	14
2.2.1 Resolución numérica mediante CFD.....	18
2.3 Fundamentos de combustión .....	20
2.3.1 Parámetros globales de la combustión .....	20
2.3.2 Fases de la combustión de un chorro Diesel .....	21
2.3.3 Modelado de la combustión .....	22
2.4 Fundamentos de formación de hollín .....	24
2.4.1 Modelos empíricos.....	27
2.4.1.1 Modelo HIROYASU-NSC .....	28
2.4.2 Modelos fenomenológicos .....	31
2.4.2.1 Modelo Gokul.....	32
2.4.3 Modelos detallados .....	37

<b>Capítulo 3 Metodología y equipos .....</b>	<b>38</b>
3.1 Introducción.....	39
3.2 Casos objeto de la simulación.....	40
3.3 Software .....	42
3.3.1 CONVERGE .....	42
3.3.2 MATLAB.....	42
3.4 Equipos.....	43
3.5 Metodología.....	43
3.5.1 Preparación de los casos.....	44
3.5.1.1 Parámetros físico-químicos.....	44
3.5.1.2 Parámetros de resolución numérica .....	47
3.5.1.3 Condiciones iniciales internas y de contorno .....	48
3.5.1.4 Modelo de combustión .....	49
3.5.1.5 Modelo de hollín .....	49
3.5.1.6 Modelo de turbulencia.....	51
3.5.1.7 Modelos en la inyección .....	51
3.5.1.8 Mallado y obtención de datos.....	53
3.5.2 Post-procesado de la información .....	55
<b>Capítulo 4 Análisis de resultados .....</b>	<b>56</b>
4.1 Introducción.....	57
4.2 Caso nominal.....	58
4.2.1 Ignition delay.....	59
4.2.2 Lift-off length.....	59
4.2.3 Penetración del chorro.....	60
4.2.4 Masa de hollín .....	61
4.2.5 Fracción volumétrica de hollín.....	65



4.2.6 Distribución espacial del hollín.....	67
4.3 Variaciones en las condiciones de operación .....	70
4.3.1 Ignition Delay .....	71
4.3.2 Lift-off Length .....	72
4.3.3 Penetración del chorro.....	74
4.3.4 Masa de hollín .....	75
4.3.5 Fracción volumétrica de hollín .....	78
4.4 Variación en la geometría de la tobera .....	81
4.4.1 Ignition Delay .....	81
4.4.2 Lift-off length.....	83
4.4.3 Penetración del chorro.....	84
4.4.4 Masa de hollín .....	84
<b>Capítulo 5 Conclusiones y trabajos futuros.....</b>	<b>92</b>
5.1 Introducción.....	93
5.2 Conclusiones .....	94
5.3 Trabajos futuros .....	95
<b>Capítulo 6 Bibliografía.....</b>	<b>96</b>
 <b>DOCUMENTO II. PRESUPUESTO</b>	
<b>Capítulo 1 Introducción .....</b>	<b>1</b>
<b>Capítulo 2 Cuadro de precios unitarios .....</b>	<b>2</b>
<b>Capítulo 3 Cuadro de precios descompuestos. ....</b>	<b>5</b>
<b>Capítulo 4 Presupuesto y mediciones .....</b>	<b>7</b>

## INDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 Ejemplo de tres celdas en un espacio unidimensional [4] .....	18
Figura 2.2 Progreso de combustión de un chorro Diesel. Imagen de [7] desde [8] y [9].....	22
Figura 2.3 Composición media típica del hollín en MEC. [6] .....	24
Figura 2.4 Diagrama de division del flujo en el modelo HIROYASU [13].....	28
Figura 2.5 Estructura del pireno [18].....	33
Figura 3.1 Geometría del caso Spray A .....	44
Figura 3.2 Menú de elección de simulación del gas.....	45
Figura 3.3 Condiciones del líquido en los paquetes .....	45
Figura 3.4 Especificación del mecanismo químico .....	46
Figura 3.5 Parámetros globales de las ecuaciones de transporte.....	46
Figura 3.6 Parámetros temporales .....	47
Figura 3.7 Definición de las condiciones iniciales.....	48
Figura 3.8 Definición de las condiciones de controno.....	49
Figura 3.9 Selección de las constantes en el modelo Hiroyasu-NSC .....	50
Figura 3.10 Selección de modelo fenomenológico y constantes correspondientes .....	51
Figura 3.11 Menú de modelado de la inyección.....	53
Figura 3.12 Selección de los parámetros de control del mallado adaptativo .....	54
Figura 3.13 Selección de los datos a obtener .....	54
Figura 4.1 ID del Spray A nominal .....	59
Figura 4.2 LOL del Spray A nominal.....	60
Figura 4.3 Penetración del chorro del Spray A nominal.....	61
Figura 4.4 Evolución de la masa de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Hiroyasu-NSC en el Spray A nominal.....	62
Figura 4.5 Evolución de la masa de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Hiroyasu-NSC calibrado y sin calibrar en el Spray A nominal .....	63
Figura 4.6 Evolución de la masa de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Gokul en el Spray A nominal.....	64

Figura 4.7 Distribución espacial de la fracción volumétrica de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Gokul e Hiroyasu-NSC calibrado en el Spray A nominal.....	65
Figura 4.8 Valores de la fracción volumétrica de hollín en el ensayo experimental del Spray A nominal durante la llama en estado cuasi-estacionario .....	68
Figura 4.9 Valores de la fracción volumétrica de hollín obtenidos con el modelo Gokul para el Spray A nominal, durante la llama en estado cuasi-estacionario .	68
Figura 4.10 Valores de la fracción volumétrica de hollín obtenidos con el modelo Hiroyasu-NSC para el Spray A nominal, durante la llama en estado cuasi-estacionario.....	68
Figura 4.11 Valores de la fracción másica de acetileno para el Spray A nominal, durante la llama en estado cuasi-estacionario .....	69
Figura 4.12 Valores de la fracción másica de pireno para el Spray A nominal, durante la llama en estado cuasi-estacionario .....	69
Figura 4.13 ID de los distintos casos del Spray A.....	71
Figura 4.14 LOL de los distintos casos del Spray A .....	72
Figura 4.15 Evolución del LOL para los distintos casos del Spray A.....	73
Figura 4.16 Penetración del chorro de los distintos casos del Spray A.....	74
Figura 4.17 Evolución de la masa de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Hiroyasu-NSC, calibrado para el caso nominal, en los distintos casos del Spray A.....	76
Figura 4.18 Evolución de la masa de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Gokul en los distintos casos del Spray A nominal .....	77
Figura 4.19 Distribución espacial de la fracción volumétrica de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Gokul y el Hiroyasu-NSC, calibrado para el caso nominal, en los distintos casos del Spray A. La de arriba del todo se corresponde con el caso menos reactivo, la central con el caso nominal, y la de abajo con el caso más reactivo.....	79
Figura 4.20 ID del caso nominal en Spray A/D.....	82
Figura 4.21 LOL del caso nominal en Spray A/D .....	83
Figura 4.22 Penetración de chorro en el caso nominal del Spray A/D .....	84

Figura 4.23 Evolución de la masa de hollín de los datos ECN con el resultado del modelo Hiroyasu-NSC, calibrado para el caso nominal del Spray A, para el caso nominal del Spray A/D.....	86
Figura 4.24 Evolución de la masa de hollín de los datos ECN con el resultado del modelo Gokul para el caso nominal del Spray A/D .....	87
Figura 4.25 Avance de los chorros del Spray A/D para el instante 1,6 ms.....	88
Figura 4.26 Avance de los chorros del Spray A/D para el instante 2,1 ms.....	89
Figura 4.27 Valores de distintos ensayos del hollín del caso nominal del Spray A con n-dodecano obtenida en las instalaciones del laboratorio Sandia-ECN [23]91	

## **INDICE DE TABLAS**

Tabla 3.1 Condiciones de inyección del Spray A.....	41
Tabla 3.2 Condiciones termodinámicas del Spray A.....	41
Tabla 4.1 Geometría del Spray A.....	58
Tabla 4.2 Condiciones termodinámicas del caso 800-15.....	70
Tabla 4.3 Condiciones termodinámicas del caso 900-21.....	70
Tabla 4.4 Geometría del Spray D .....	81



**DOCUMENTO I**

**MEMORIA**





# Capítulo 1

## Introducción y planteamiento

## **1.1 Introducción**

En este primer capítulo se define la situación de los procesos de combustión objeto de nuestro estudio en la actualidad, resaltando los avances que se han hecho concretamente en lo que respecta a la modelización de la formación de partículas de hollín. Se destaca la importancia del control de este parámetro tanto para la consecución de una combustión lo más limpia posible, como para el control desde su tratamiento como contaminante. Se sigue con los objetivos, justificación, motivación y comprobación de la viabilidad del proyecto. Finalmente, en un último punto se especifica la estructura seguida en el resto del documento.

## **1.2 Antecedentes**

Los procesos de combustión tienen un gran protagonismo en multitud de aplicaciones, y es su uso extensivo el que obliga a establecer exhaustivos controles debido a los posibles contaminantes producidos. Por ello se debe controlar la emisión de éstos no solo mediante el post-tratamiento de humos, sino mediante el diseño de un adecuado proceso de combustión. Debido a ello, un paso crítico durante el diseño de motores de combustión es un estudio previo que trate de determinar cuáles serán las emisiones producidas durante el funcionamiento de los mismos.

Si bien se está iniciando un proceso de descarbonización que busca la sustitución en la medida de lo posible de esta clase de motores [1], durante dicho proceso de transición energética se debe seguir buscando mejorar estos sistemas, minimizando el posible daño que puedan provocar. A eso hay que añadir que existen diversas aplicaciones donde no existe sustitución viable en la actualidad al uso de los motores de combustión, así como que se han desarrollado tecnologías sostenibles que hacen uso de los mismos. Por todo ello es necesario seguir mejorando e investigando en este campo.

De los motores de combustión interna, para determinadas aplicaciones los más extendidos son los motores de combustión interna alternativos, debido a su capacidad para funcionar adecuadamente en diferentes regímenes y a diferentes cargas, y dentro de éstos, los más competitivos son los motores Diesel, debido a su consumo más reducido y a su alta potencia específica [2]. De éstos, las emisiones contaminantes principales son los  $\text{NO}_x$  y las partículas sólidas [3], por lo que la correcta modelización de ambos es crítica para que el diseño sea el adecuado, y que así se cumplan las regulaciones medioambientales, cada vez más exigentes.

El modelado de la formación de partículas durante la combustión se está buscando desarrollar dentro de las técnicas de CFD, con los consiguientes problemas derivados de la superposición de procesos complejos que tienen lugar

durante la combustión de un chorro líquido de Diesel, como es el caso. Para posibilitar el cálculo de este tipo de procesos es necesario recurrir a modelos. Debido a los diferentes fenómenos que se quieren estudiar existe también una superposición de las incertidumbres e inexactitudes que añade cada modelo respecto a la situación real. Los modelos utilizados se aplican para resolver el chorro la turbulencia, la combustión y las emisiones [2]. En este caso hay que añadir, además, modelos físico-químicos que atiendan a la formación y crecimiento de las partículas sólidas, usados en conjunción con los antes mencionados. Finalmente, este conjunto hace que se trate un problema especialmente complicado de abordar y resolver con la exactitud adecuada.

Los modelos usados en aspectos como la cinética química o la turbulencia no se discuten en este trabajo, explicando únicamente los que hayan sido utilizados para nuestros casos de estudio. En cambio, sí que se ahonda en los diferentes modelos utilizados para la producción de hollín.

Actualmente se vienen utilizando diversos modelos para la formación de partículas sólidas, las cuales se pueden dividir en tres grupos. El primero de ellos es el de los modelos empíricos, el cual tiene un uso poco generalista debido a su descripción y ajuste limitados a unas condiciones de operación concretas, por lo presenta limitaciones a la hora de usarse en el diseño predictivo. El segundo es el de los modelos fenomenológicos o semi-empíricos, que ya alcanzan un nivel aceptable de detalle, y un adecuado valor predictivo, pero sin incurrir en un coste computacional demasiado alto. Finalmente están los modelos detallados, con el nivel más alto de definición, pero con una eficiencia computacional menor, por lo que no siempre son adecuados si las necesidades de análisis no lo requieren [4]. Durante este trabajo se ha ahondado principalmente en modelos empíricos y semi-empíricos, los cuales son evaluados comparándolos con datos experimentales proporcionados por los laboratorios de la *Engine Combustion Network* [5], dedicados a repetir y comparar ensayos en este campo.

### **1.3 Objetivo del proyecto**

El objetivo del proyecto se divide en dos metas principales, la primera es la realización de una serie de simulaciones que permitan la validación de determinados modelos para la formación de hollín durante la combustión de chorros Diesel en condiciones de operación representativas de motores de encendido por compresión. Se busca contar con algún método de simulación con un tiempo de cálculo asumible, que cuente con características predictivas adecuadas para ser usado en la fase de diseño, sin necesidad de ajustar los parámetros según las condiciones específicas del caso.

Para ello se harán simulaciones con diferentes casos de dicho fenómeno con los que se cuentan con datos experimentales, para así comprobar la validez de los modelos, post-procesando la información obtenida adecuadamente para que pueda ser comparada y analizada.

La segunda meta es la realización del Trabajo de Fin de Máster para la obtención del Máster Universitario en Ingeniería Industrial, con intensificación en Generación de Energía, por la Universitat Politècnica de València (UPV).

## **1.4 Justificación**

Las fases de diseño previas a la calibración, que se dan durante el desarrollo de motores, son de gran importancia para evitar cometer errores que alarguen el proceso obligando a rediseñar partes del mismo. Por ello, es necesario contar con herramientas de diseño y modelado lo más fiables posibles para evitar estos errores.

La producción de contaminantes se ha convertido en un conjunto de parámetros principal para el diseño de motores, debido a la creciente concienciación respecto a su impacto ambiental y el correspondiente endurecimiento de los estándares de diseño permitidos.

Por todo ello, contar con herramientas de cálculo predictivas lo más fiables posibles agilizará el proceso de diseño de esta clase de sistemas, además de limitar la necesidad de usar sucesivos motores de ensayos con diferentes diseños.

## **1.5 Motivación**

La realización de este trabajo forma parte del desarrollo de una línea de investigación que ha ido incorporando diferentes modelos a la simulación de procesos de inyección y combustión. Con ello se quiere conseguir ir aunando información de la validez de diferentes modelos, y de la superposición de los mismos, para la obtención de herramientas que permitan mejorar la capacidad predictiva de las simulaciones en esta clase de motores. Tras validaciones previas referentes al chorro y a la combustión del mismo, el siguiente paso consiste en el modelado de los contaminantes producidos.

También se desarrolla este trabajo para profundizar en aspectos concretos del área de estudios específica de la intensificación de generación de energía. Además, se consigue el desarrollo de competencias en el manejo de herramientas usadas en otros múltiples campos de la ingeniería, como el uso de programas de mecánica de fluidos computacional, o el tratamiento de grandes cantidades de datos mediante el desarrollo y codificación de rutinas de post-procesado.

## **1.6 Viabilidad**

La viabilidad de esta actividad está relacionada con tres aspectos. Siendo el primero de ellos la viabilidad económica, la cual queda asegurada a través del Instituto Universitario CMT - Motores Térmicos, adscrito a la UPV, al necesitarse el desarrollo de este trabajo dentro de sus labores de investigación y de servicios a empresas, en términos de colaboración público-privada. La viabilidad humana, garantizada igualmente por dicho instituto al tener a disposición del desarrollo del mismo el personal necesario para su consecución, además de formas de trabajo ya desarrolladas debido a su experiencia en la realización por parte de alumnos de este tipo de proyectos. Y finalmente la viabilidad tecnológica, asegurada por un lado por el Instituto al contar con los equipos y licencias necesarias para el desarrollo del trabajo, y por otro lado por la misma UPV en términos generales, al hacerse uso de la red de computación presente en la misma para la realización de las simulaciones necesarias.



## **1.7 Estructura del trabajo**

El presente trabajo final de Máster contará con dos documentos principales, los cuales a su vez seguirán el desarrollo descrito a continuación.

- En este primer documento, se continuará en el segundo capítulo describiendo algunos de los distintos modelos existentes para el modelado de los procesos de mecánica de fluidos y combustión, además de para la formación de hollín, así como los principios teóricos en los que se fundamentan los mismos.
- En el tercer capítulo se hará una definición de las diferentes herramientas y métodos usados para el desarrollo del trabajo, especificando además las formas de utilización de los mismos.
- En el siguiente se describen los casos concretos de estudio que se van a simular, y se presentan los resultados obtenidos, haciendo los análisis pertinentes que los justifiquen.
- En un último capítulo se presentan las conclusiones obtenidas y se listan los posibles futuros trabajos a realizar en este campo.
- Finalmente se concluirá con la bibliografía usada para la elaboración del documento.

En el siguiente documento se realiza el presupuesto del proyecto realizado, con sus descomposiciones y agrupaciones correspondientes.

# Capítulo 2

## Fundamentos teóricos y de modelado

## **2.1 Introducción**

En el siguiente capítulo se hará un repaso por los fundamentos teóricos implicados en los procesos de combustión de chorros de combustible en motores de encendido por compresión.

Se harán estos estudios en concreto de los conceptos relativos a la mecánica de fluidos, a la combustión, y a los conceptos específicos de formación de hollín. Además, se hará una presentación de los conceptos de modelado prestando especial atención a los que tienen un peso relevante en el desarrollo de este trabajo. De éstos se especificará cuáles serán los usados en las simulaciones llevadas a cabo.

## 2.2 Fundamentos de mecánica de fluidos

En este proyecto se van a simular distintos casos de inyección de combustible en condiciones de motor de encendido por compresión. Esto hace que se tengan que modelar múltiples procesos como son la inyección de líquido, su atomización en gotas, el arrastre de las mismas, la evaporación de éstas y finalmente la combustión y producción de hollín.

Tanto el modelado de los procesos de combustión, como el de los subprocesos propios de ésta, se encuentran integrados dentro de las técnicas de modelado de mecánica de fluidos. Estas técnicas, comúnmente conocidas como mecánica de fluidos computacional, o CFD, de sus siglas en inglés, se han desarrollado ampliamente en los últimos años. Lo han hecho debido a un aumento notable en la potencia de computación alcanzable, lo cual no había sido posible en décadas anteriores [2].

Estas técnicas consisten en la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes mediante métodos numéricos para cada una de las distintas celdas en las que se divide el espacio que contiene al problema. Estas ecuaciones son la ecuación de la conservación de la masa, especies, momento y energía. La forma general de estas ecuaciones conservativas es la de la ecuación de transporte, la cual variará según la magnitud que se esté resolviendo. Los términos generales de dicha ecuación son el término de acumulación, el conectivo, el difusivo y el término fuente. Las ecuaciones se presentan como se encuentran integradas en el software de cálculo utilizado [4]. Para la primera de las ecuaciones, la de conservación de la masa, no existe término difusivo, quedando la misma como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = S \quad (2.1)$$

Existe un término fuente debido a la adición de masa al sistema en los casos simulados. Lo que no hay es término difusivo, porque se supone que todo

el espacio del problema está inicialmente ocupado por masa. Sus unidades son  $\text{kg s}^{-1}\text{m}^{-3}$ .

Las ecuaciones de conservación del momento se dan para cada una de las direcciones del flujo, quedando

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \dot{S}_i \quad (2.2)$$

Donde el tensor de esfuerzo viscoso es

$$\sigma_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left( \mu' - \frac{2}{3} \mu \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.3)$$

En estas ecuaciones los términos se corresponden con  $u$  como velocidad,  $\rho$  como densidad,  $P$  la presión,  $\mu$  y  $\mu'$  la viscosidad y la viscosidad de dilatación respectivamente y  $\delta_{ij}$  la delta de Kronecker. La viscosidad se sustituye en los cálculos por la viscosidad total si se aplica algún modelo de turbulencia, pasando a ser

$$\mu_{tot} = \mu_{mol} + C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.4)$$

Aquí  $\mu_{mol}$  es la viscosidad molecular,  $C_\mu$  una constante de turbulencia del modelo,  $k$  la energía cinética turbulenta y  $\varepsilon$  la disipación turbulenta.

La ecuación de conservación de especies, tendrá tantas versiones como especies introduzca la química. En este caso la magnitud a resolver es la fracción másica de la especie en cuestión  $Y_m$ . La expresión es la siguiente

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + \dot{S}_m \quad (2.5)$$

Las unidades son las mismas que en el caso de la ecuación de conservación de la masa. En esta ecuación el termino difusivo se corresponde con la ley de Fick, mientras que el término fuente se obtiene del desarrollo de la química durante la resolución. En dicho término difusivo,  $D$  representa el coeficiente de difusión másica, el cual variará en caso de tener en cuenta la turbulencia. Está relacionado con el coeficiente de difusión viscosa  $\nu$  y con el número de Schmidt, que representa el cociente entre ambos.

Respecto a la ecuación de conservación de la energía, para la resolución de un problema con flujo en estado gaseoso, implica la necesidad de tener en cuenta la compresibilidad del mismo. A la misma, además de los términos de la ecuación de transporte antes mencionados, se le añaden, un término de presión debido a los cambios de densidad, uno de disipación viscosa, y un segundo término de difusión. Este último es debido al transporte de energía asociado a la difusión de especies. Por ello la expresión queda como

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial u_j e}{\partial x_j} = -P \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( K \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \sum_m h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S \quad (2.6)$$

En esta expresión las nuevas variables implicadas son  $e$  como la energía interna específica,  $T$  como la temperatura,  $K$  la conductividad, y  $h_m$  como la entalpía de la especie. La conductividad se sustituirá por la conductividad turbulenta si se cuenta con un modelo de turbulencia activo. En ese caso pasará a ser

$$K_t = K + c_p \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad (2.7)$$

Siendo  $c_p$  el calor específico,  $\mu_t$  la viscosidad turbulenta, y  $Pr_t$  el número de Prandtl turbulento, definido como

$$Pr_t = \frac{c_p \mu_t}{k_t} \quad (2.8)$$

Donde  $k_t$  es la conductividad turbulenta.

Al tratarse, como se ha mencionado antes, de un problema de flujo compresible es necesaria además una ecuación de estado para acoplar densidad, presión y temperatura [4]. Se usa la ecuación de los gases ideales, que tiene la forma

$$\frac{P}{\rho} = \left(\frac{R}{W}\right)T \quad (2.9)$$

Siendo  $R$  la constante de gases ideales y  $W$  el peso molecular. Aunque esta se puede intercambiar por ecuaciones cúbicas si se desea.

A estas ecuaciones hay que añadir otra ecuación de transporte, que es la de conservación para el hollín, ya que éste se tendrá que resolver junto con el resto de ecuaciones simultáneamente, siempre que se añada un modelo fenomenológico para el mismo. En este caso la ecuación se define como

$$\frac{DM}{Dt} = \nabla \left( \frac{\mu}{SC} \nabla \left( \frac{M}{\rho} \right) \right) + S_M \quad (2.10)$$

Donde  $M$  representa o la masa de hollín por unidad de volumen o el número de partículas de hollín por unidad de volumen,  $SC$  el número de Schmidt,  $\mu$  la viscosidad y  $S_M$  el término fuente del hollín, de cuya obtención se habla más adelante.

Éstas no son las únicas ecuaciones de transporte a resolver en nuestras simulaciones, ya que se añade un modelo de turbulencia. En nuestro caso es el  $k$ - $\varepsilon$  y se necesita añadir una ecuación más para el transporte de la energía cinética turbulenta, y otra para la disipación de la energía cinética turbulenta. Es un modelo dentro del método RANS, donde, a raíz de dichos valores calculados se promedian términos en el resto de ecuaciones de Navier-Stokes.

### 2.2.1 Resolución numérica mediante CFD.

Como se ha dicho antes, las ecuaciones de conservación, de aplicación en la fase gaseosa, se resuelven para las distintas celdas en las que se va a dividir el espacio en el que se contiene la simulación, siendo cada una de ellas un volumen de control específico donde se aplicarán. Esto implica que la resolución de dicha fase gaseosa se hará desde el punto de vista Euleriano.

La división de celdas se hace a raíz del método de resolución por métodos finitos, donde las ecuaciones antes planteadas se resuelven para cada celda usada como volumen de control donde se hace el microbalance, siendo los valores de salida de las magnitudes de una celda los valores de entrada de la adyacente (Figura 2.1). Con ello se consiguen valores locales con una alta resolución, y así se consigue tener una representación veraz del flujo.

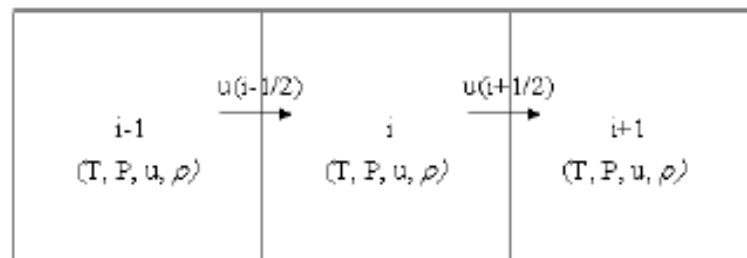


Figura 2.1 Ejemplo de tres celdas en un espacio unidimensional [4]

Para resolver éstas ecuaciones es necesario interpolar las magnitudes en la superficie de la celda [4]. Esta interpolación se hace promediando los valores de las celdas que compartan dicha superficie. Otro modo, será el de dar a la superficie el valor de la magnitud de propia de la celda que tenga la magnitud saliente por dicha superficie.

El tamaño de estas celdas a lo largo del dominio del problema no tiene por qué ser uniforme, puede tener un tamaño variable con el tiempo o ser estacionario. La distribución de tamaños suele adecuarse a la necesidad de especificación de valores, por lo que en las zonas con mayores gradientes en las diferentes magnitudes se buscará una mayor resolución de la malla.



En cuanto a la fase líquida, ésta no se resuelve de la misma manera. El planteamiento en este caso es Lagrangiano, dividiendo el espacio en el que se encuentra el líquido en paquetes, siendo únicamente el combustible original la especie presente en esta fase. Dicho líquido sufrirá el efecto de la rotura en gotas, coalescencia y arrastre que deberán ser simulados conforme a modelos específicos. También lo hará la evaporación de las mismas, dando origen al cambio de fase del combustible de líquido a gaseoso que no formará parte de los paquetes. Éste formará parte de las celdas que ocupen el mismo espacio en la que se encuentra la parcela en la que se da la evaporación.

De esta forma, el combustible evaporado será un término fuente en las ecuaciones de la fase gaseosa, tanto como para la ecuación de conservación de la masa como para la de cantidad de movimiento. Así es como se consigue la unión entre las dos fases, que se encuentran resueltas de forma totalmente desacoplada.

Respecto a los modelos utilizados en la fase líquida, no se explican al no ser de importancia en cuanto al objeto de discusión en este trabajo, únicamente mencionando más adelante cuales han sido los utilizados en los casos simulados.

## 2.3 Fundamentos de combustión

El proceso de combustión de un chorro de combustible se puede dar de diferentes maneras, ya que diferentes combustibles y tipos de motores implicarán diferentes tipos de combustiones. En nuestro caso al tratarse de un motor Diesel, el mismo tendrá diferentes fases una vez se haya producido la evaporación. Dichas fases vienen definidas a continuación. Inicialmente se introducen dos conceptos sobre la combustión necesarios más adelante.

### 2.3.1 Parámetros globales de la combustión

**Tiempo de retraso (*ignition delay*):** Comprende entre el momento de inicio de inyección del combustible (SOI) y el momento de inicio de la combustión (SOC). En este tiempo el combustible se evaporará y se mezclará con el aire presente en la cámara de combustión. Ésta mezcla en las condiciones de inyección no será estable por lo que el combustible inicial comenzará un proceso de deshidrogenación y rotura de la cadena de combustible [6], en un proceso homólogo al que ocurre en una zona de precalentamiento en la combustión laminar. Estas reacciones son exotérmicas, pero de baja intensidad. Esto se sostiene hasta que la energía es la suficiente como para provocar el autoencendido. Se tratará dicho concepto a partir de este apartado como ID, de sus siglas del inglés *Ignition Delay*.

**Longitud de lift-off (*lift-off length*):** Durante el proceso de combustión, mientras exista el aporte de combustible, éste pasará por los distintos procesos previos a su evaporación, y posteriormente, se mantendrá inerte mientras se mezcla con el aire hasta que alcance las condiciones necesarias para la reacción, es decir para el autoencendido. Con ello, se tiene una zona inmediatamente adyacente a la tobera de inyección en la que no existe combustión alguna por parte del combustible añadido, al no dar tiempo a que ninguna fracción del mismo pase por todos esos procesos. A esta distancia entre la tobera y el punto de inicio del autoencendido, nos referiremos longitud de lift-off (en inglés, LOL).

### **2.3.2 Fases de la combustión de un chorro Diesel**

A continuación se definen las diferentes fases de la combustión de un chorro Diesel en condiciones de motores de encendido por compresión [7].

**Combustión premezclada:** Se trata de un proceso momentáneo en el que se produce una rápida combustión, ya que no está gobernada por el flujo si no por la cinética química [2]. En ella se consume el combustible inicial ya roto en moléculas menores de forma instantánea, que se encuentra mezclado con el aire. En esta combustión se produce una alta tasa de generación de calor que provoca que la nueva masa entrante a partir de ese instante, no tarde tanto tiempo en autoencenderse como lo masa inyectada inicialmente. Esto ocurre debido a que existe energía suficiente como para provocar la rotura de la cadena de combustible, y su posterior ignición cuando se mezcla de manera aproximadamente estequiométrica con el aire.

**Combustión por difusión:** En esta fase la combustión se produce únicamente en la región en la que las especies combustibles llegan a encontrarse con las especies oxidantes en condiciones estequiométricas, por eso, en este estadio del proceso, es el flujo el que controla la combustión, ya que esta depende de la tasa de mezcla más que de la cinética química [7]. Esta región es la conocida como el frente de llama, y se trata del lugar en el que la mezcla entre el aire y combustible es aproximadamente la estequiométrica. La tasa de liberación de calor en esta fase es menor que en el caso de la combustión premezclada.

**Combustión por difusión tardía:** Esta fase comienza cuando finaliza el aporte de combustible. En ella se tiene un decaimiento de la tasa de producción de calor debido a una ralentización de la combustión. Esto ocurre ya que, siendo la misma gobernada por el flujo a través de la tasa de mezcla, ve disminuida dicha tasa de mezcla. Ocurre como consecuencia de la desaparición del aporte de cantidad de movimiento producido por el chorro de combustible. El proceso completo viene esquematizado en la Figura 2.2.

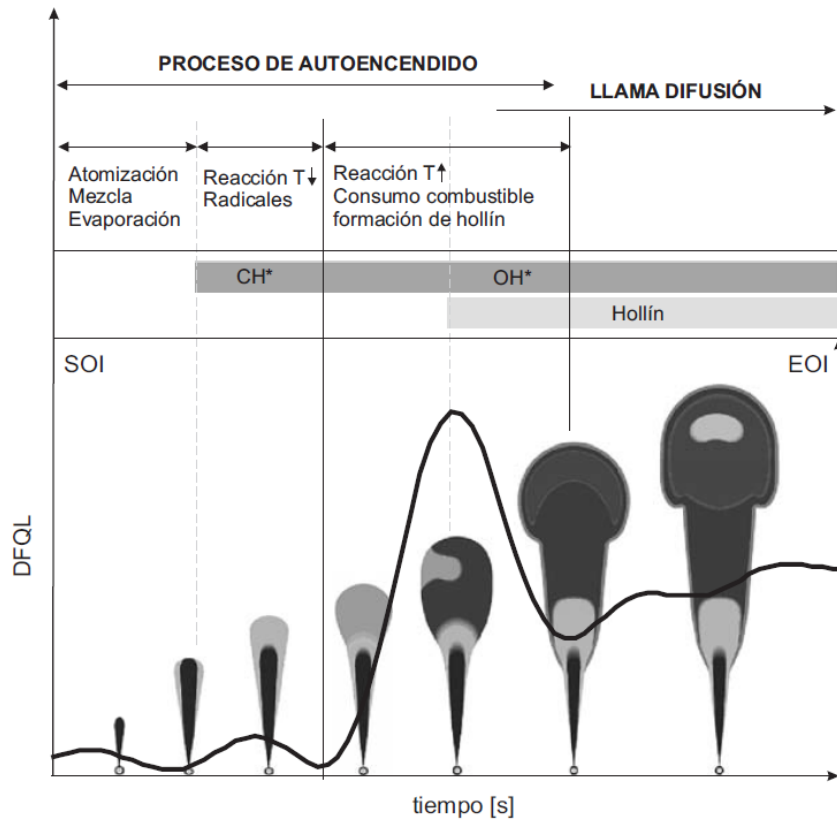


Figura 2.2 Progreso de combustión de un chorro Diesel. Imagen de [7] desde [8] y [9].

En los casos con combustión por difusión, el flujo y la química influyen el uno sobre el otro, debido a los gradientes generados a raíz de la reacción química y la consiguiente liberación de energía, y por otro lado a la generación de gradientes debido al flujo turbulento [2].

### 2.3.3 Modelado de la combustión

En primer lugar, es necesario definir cuál es el mecanismo químico que va a describir la oxidación del combustible, es decir, cuáles van a ser las distintas reacciones y especies que van a estar presentes durante el proceso de combustión. Durante el desarrollo de este trabajo se ha utilizado el mecanismo desarrollado por Narayanaswamy, Pepiot y Pitsch [10], con 257 especies y 1521 reacciones diferentes. Este mecanismo fue desarrollado para el dodecano, que es la especie utilizada como *surrogate* del Diesel. La razón principal de esta elección es la inclusión de determinadas especies necesarias para los cálculos referidos al hollín.

En nuestro caso para el modelado de la combustión se usa el modelo SAGE [4], que consiste en un método de cálculo detallado de la química. Este modelo integra el mecanismo químico definido y lo resuelve cada instante para cada celda, en función de su temperatura y de las especies presentes. Al calcular, pasa la información en forma de término fuente a la ecuación de transporte de especies, que a su vez la pasa a la ecuación de la energía, resolviendo y dando un nuevo valor de temperatura para esa celda, reiniciando el proceso.

Los valores de temperatura tomados son valores promediados desde métodos RANS, ya que se obtienen de esta manera. Por lo que no se realiza un promediado general por escalas de manera posterior, al no tener en cuenta a ese nivel la interacción entre la química y la turbulencia. Esto se hace suponiendo que las especies dentro de cada celda se encuentran mezcladas convenientemente para la reacción, dependiendo la misma sólo de la temperatura, lo que se conoce con un modelo *well-mixed*.

Debido a este tipo de resolución detallada instante a instante, *on the fly*, se trata de un método de cálculo que requiere de una gran cantidad de operaciones y, por tanto, de un gran tiempo de computación.

## 2.4 Fundamentos de formación de hollín

La formación de hollín en los procesos de combustión no está definida completamente, ya que no se conocen con exactitud todos los pasos que dan lugar a la consecución de dichas partículas [11]. Las mismas, además, no tienen una morfología o composición constante, si no que éstas tienen componentes aproximados dentro de unos determinados rangos [6], con una composición media típica en motores de encendido por compresión especificada en la siguiente figura.

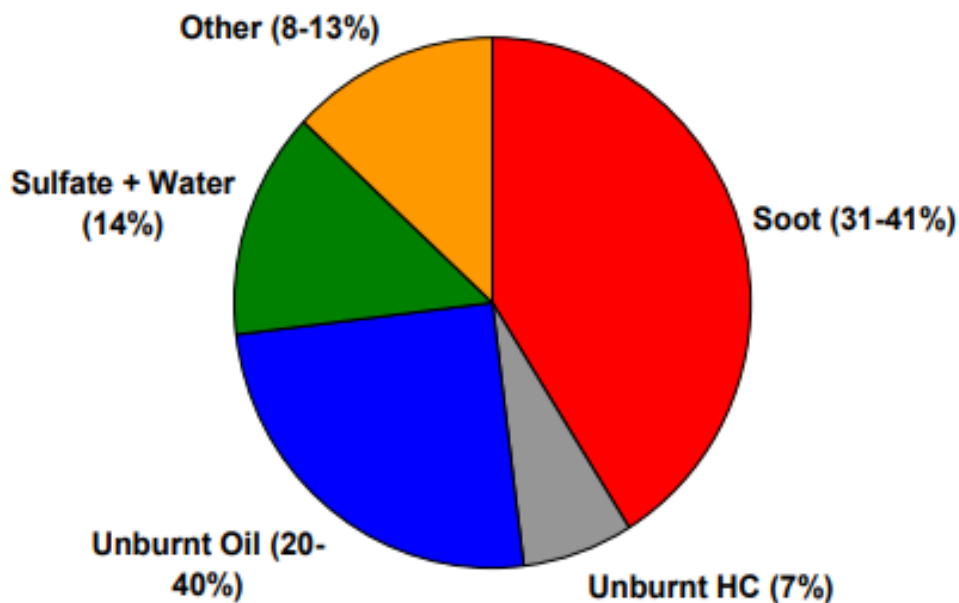


Figura 2.3 Composición media típica del hollín en MEC. [6]

Desde el punto de vista de la combustión, se modela únicamente la formación de las partículas de hollín propiamente dicho, como agrupaciones de carbono sólido deshidrogenado. Por lo tanto, no se tienen en cuenta las posteriores anexiones de hidrocarburos o aceites sin quemar, así como la humedad u otros componentes posibles.

En este apartado se hace un recorrido por algunos de los distintos métodos antes mencionados para modelar la producción de hollín en un proceso

de combustión, mencionando los distintos avances y modelos que se han ido desarrollando y el uso que se les ha dado, finalmente se hace hincapié en los modelos utilizados en el trabajo desarrollado.

Como se ha indicado anteriormente, existen tres grupos de modelos para el modelado de hollín. Cada uno con un nivel de detalle y coste computacional diferente. Los menos detallados, como son los empíricos, se basan en únicamente dos fenómenos asociados a la producción de hollín, la formación del mismo y su oxidación. Estos modelos utilizan factores para cada uno de esos dos términos, lo cual modelará cual es la producción de hollín. Los valores elegidos para dichos factores se obtienen mediante correlaciones obtenidas de resultados experimentales, aunque los mismos se pueden ajustar para nuevas situaciones, siempre que se cuente nuevamente con valores experimentales. Los siguientes, con más detalle, son los semi-empíricos o fenomenológicos. Éstos cuentan con más fenómenos asociados a su formación, los cuales pueden ser nucleación, crecimiento, coagulación y oxidación, sin ser los únicos posibles. En este caso ya se tienen en cuenta fenómenos físicos y químicos que, aunque cuenten con factores de origen experimental asociados a estos valores, ya se tiene cierto carácter generalista que permite la utilización de estos modelos en situaciones diferentes, además, se pueden llegar a obtener datos como el tamaño medio de las partículas formadas. Los últimos de los modelos son los ya mencionados modelos detallados. Éstos son similares a los fenomenológicos, contando con más fenómenos implicados, y dando la posibilidad de dar una distribución del tamaño de las partículas formadas.

En general todos los tipos de modelos tienen su origen en correlaciones empíricas obtenidas a partir de experimentación, y lo único que los diferencia es la cantidad de procesos que se modelan, dividiendo su formación y oxidación en el conjunto de fenómenos que componen dichos sucesos, cada uno con sus propias correlaciones, alcanzando cada vez un mayor nivel de detalle. Todo esto se hace teniendo en cuenta que realmente un mayor detalle no implica una mayor exactitud en cuanto a las premisas para el desarrollo de los distintos métodos de modelado. Distintos métodos de modelado utilizan a veces distintas especies

como las precursoras del hollín, y no se atiende a si una es más acertada que otra en cuanto a ajuste con la realidad, si no al ajuste entre las predicciones y la experimentación. Esto no ocurre únicamente con la elección del precursor del hollín, sino también con la elección de los procesos intrínsecos en la formación del hollín y las formas en las que se oxida, además de otros aspectos.

Esta aparente falta de consenso se debe principalmente a que no existe una definición exacta de los procesos que tienen lugar durante la formación y oxidación de hollín, en el sentido de que no están definidos analíticamente todos los mecanismos que se suceden durante el proceso. Por esta razón todos los modelos de hollín, indistintamente de los distintos procesos físicos y químicos implicados, siempre basan su funcionamiento en correlaciones empíricas entre distintas variables obtenidas a partir de experimentación, y nunca usando íntegramente la resolución explícita de ecuaciones analíticas.

Esto no quiere decir que no se tenga una idea de cómo se forma el hollín, ya que de la misma estructura que componen sus partículas, observadas tras la combustión de diferentes tipos de combustibles, se puede observar que se tratan de acumulaciones de hidrocarburos aromáticos policíclicos [12], de sus siglas en inglés PAH's. Desde esa información se han desarrollado diferentes hipótesis de cómo se forman los mismos desde los componentes combustibles originales. Desde las observaciones llevadas a cabo se ha llegado a que el origen de las partículas sólidas está o bien en el acetileno ( $C_2H_2$ ) o en moléculas de PAH's, aunque sin tener la certeza de si uno u otro es el único precursor, o en qué medida y con qué mecanismo exacto. Por ello, diferentes modelos de producción de hollín usan diferentes especies como las precursoras en su mecanismo descrito, y de manera similar ocurre con otros fenómenos implicados.

Los modelos se integran dentro de los cálculos de CFD, siendo algunos valores que se vayan calculando, los términos fuente de las ecuaciones que se resuelven para obtener el hollín formado.



### **2.4.1 Modelos empíricos**

Como se ha mencionado anteriormente, estos modelos únicamente atienden a la formación y oxidación para dar valores del hollín finalmente obtenido durante el proceso de combustión. El único valor a obtener es el de la masa de hollín formado. Las tasas de formación y oxidación, no son expresiones únicas, si no que existen diferentes correlaciones que se han ido desarrollando a lo largo del tiempo.

Inicialmente se comenzaron con relaciones lineales que sencillamente daban para una determinada reacción un índice de umbral de hollín, obteniendo las constantes a partir de calibración. Posteriormente, se propuso dar dichas relaciones ajustadas para cada especie combustible implicada en la reacción [11]. A partir de ahí se han ido sucediendo diversas aproximaciones que han ido teniendo en cuenta diferentes variables implicadas en el fenómeno a simular.

Los diferentes valores a tener en cuenta varían según el autor, y estos pueden ser de distintos tipos. Pueden estar asociados a la geometría del sistema modelado, a valores del flujo inyectado, asociados a condiciones y variables de estado del caso, y a propiedades del combustible [11]. También, dependiendo del tipo de motor, del que a su vez depende tanto el tipo de combustible como de combustión, se hacen consideraciones propias incluidas en la correlación desarrollada. De entre las iniciales, se incluían valores como la presión, la temperatura, parámetros de mezcla entre aire y combustible, valores del flujo etc. Posteriormente se añadieron parámetros asociados a la turbulencia, la composición de combustible, y la fracción másica de combustible [11].

De los últimos parámetros mencionados, la fracción másica de combustible, es uno de los parámetros concretos que posteriormente derivó en la utilización de ciertas especies concretas como precursores en las expresiones para la producción de hollín.

Esta clase de modelos siguen teniendo validez cuando se cuentan con valores experimentales que permitan su ajuste, pero no cuentan con garantías que aseguren su fiabilidad en situaciones muy diferentes, o en diseños

significativamente distintos de los que se han obtenido datos experimentales [11]. Pese a ello, como contraste entre distintos modelados posibles de los llevados a cabo durante el desarrollo de este trabajo, se llevará a cabo el uso de uno de ellos, en concreto del modelo desarrollado a partir del propuesto por Hiroyasu, Kadota y Arai [13].

#### 2.4.1.1 Modelo HIROYASU-NSC

El modelo en el que se basa fue desarrollado para motores Diesel de inyección directa, como es el caso de las simulaciones que han de llevarse a cabo. Dicho método se definió para predecir también parámetros como la eficiencia o el rendimiento, pero solamente entraremos en la definición de su modelo de hollín. Este método, además, se desarrolló pensando en la obtención de la información necesaria para el modelado de hollín desde un modelo de producción de calor. Éste dividía el flujo de la inyección simulada en “paquetes” (Figura 2.4), de una forma similar a las celdas en las que se divide el flujo en los cálculos llevados a cabo en nuestro caso.

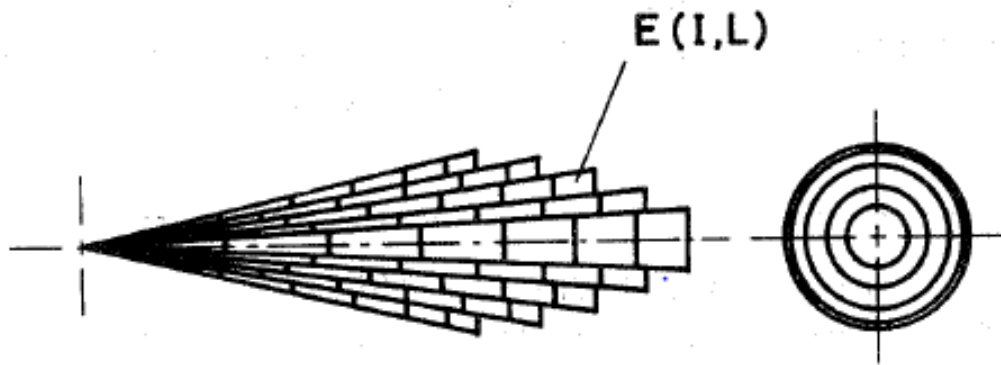


Figura 2.4 Diagrama de división del flujo en el modelo HIROYASU [13].

En nuestro caso la aplicación del mismo también se hará de manera local en cada una de las celdas, lo cual nos dará valores de la producción de hollín a lo largo de todo el flujo. Con ello se pretenden obtener medidas, no únicamente de la producción de hollín neta, si no de la distribución de las zonas en las que se

produce. El ratio de producción de hollín, según éste modelo, cuenta con parámetros de los mencionados antes como los primeros y más genéricos a tenerse en cuenta. Estos son la temperatura, la presión y el dosado de la mezcla aire-combustible. Las expresiones que definen el modelo Hiroyasu son las siguientes.

$$\frac{dm_s}{dt} = \frac{dm_{sf}}{dt} - \frac{dm_{sc}}{dt} \quad (2.11)$$

Siendo  $m_s$  la masa de hollín generado y  $m_{sf}$  y  $m_{sc}$  la masa de hollín formada y oxidada respectivamente. Cada una con su correspondiente expresión, en el caso de la masa de hollín formado:

$$\frac{dm_{sf}}{dt} = A_f \cdot m_{fg} \cdot P^{0,5} \cdot \exp\left(\frac{-E_{sf}}{R \cdot T}\right) \quad (2.12)$$

Y la de hollín oxidado:

$$\frac{dm_{sc}}{dt} = A_c \cdot m_s \cdot \frac{P_{O_2}}{P} P^{1,8} \cdot \exp\left(\frac{-E_{sc}}{R \cdot T}\right) \quad (2.13)$$

En éstas, el hollín formado depende de la masa de combustible evaporado ( $m_{fg}$ ), que es el término fuente en esta expresión, la presión y la temperatura en el paquete, en MPa y K respectivamente, y una constante conocida como la energía de activación de la formación de hollín con un valor de  $1.25 \times 10^4$  kcal/kmol, además de la constante universal de gases ideales. Por último  $A_f$  se trata de una constante de calibración obtenida a partir de resultados experimentales cuyas unidades son  $1/(\text{s bar}^{0.5})$ .

En el caso de la masa de hollín oxidado, se utiliza la masa de hollín formado, el ratio aire-combustible a partir de las presión parcial del oxígeno, la energía de activación de la oxidación. Además de la temperatura y la presión ya usados en el hollín formado. En este caso también se cuenta con un parámetro  $A_c$  de calibración, también obtenida a partir de resultados experimentales.

En las simulaciones llevadas a cabo en este trabajo no se usa esta última expresión para la oxidación del hollín, si no que se usa un modelo empírico de oxidación de carbono desarrollado por Nagle y Strickland-Constable [14], el cual viene desarrollado en el manual del software de cálculo utilizado [4].

En ella el ratio de oxidación viene dado por una expresión que, al igual que en el caso del modelo original del Hiroyasu, Kadota y Arai [13], depende de la temperatura y la presión parcial del oxígeno. Ésta tiene en cuenta la superficie supuesta de las partículas sólidas, donde se produciría la oxidación por dos mecanismos diferentes, según haya más o menos reactividad. La masa de hollín en este caso viene dada por la siguiente expresión.

$$\frac{dm_{sf}}{dt} = A_c \cdot \frac{6}{\rho_s \cdot D_s} R_{total} \cdot MW_c \quad (2.14)$$

Siendo  $A_c$  la constante de calibración de este caso,  $\rho_s$  y  $D_s$  la densidad y el diámetro supuestos de las partículas de hollín, y  $MW_c$  el peso molecular del carbono. El ratio de reacción  $R_{total}$ , en mol/cm<sup>2</sup> s, viene dividido en función de zonas más o menos reactivas. La proporción de las zonas más reactivas se define como

$$X = \frac{P_{O_2}}{P_{O_2} + (K_T/K_B)} \quad (2.15)$$

Y el ratio de reacción esta descrito como

$$R_{total} = \left( \frac{K_A \cdot P_{O_2}}{1 + K_T \cdot P_{O_2}} \right) \cdot X + K_B \cdot P_{O_2} \cdot (1 - X) \quad (2.16)$$

Con las constantes implicadas, obtenidas a partir de correlaciones como

$$\begin{aligned}K_A &= 20 \exp\left(-\frac{30000}{R \cdot T}\right) \quad \{mol/cm^2s^1atm^1\} \\K_B &= 4.46 \times 10^{-3} \exp\left(-\frac{15200}{R \cdot T}\right) \{mol/cm^2s^1atm^1\} \\K_T &= 1.51 \times 10^5 \exp\left(-\frac{97000}{R \cdot T}\right) \quad \{mol/cm^2s^1\} \\K_Z &= 21.3 \exp\left(\frac{4100}{R \cdot T}\right) \quad \{1/atm\}\end{aligned} \tag{2.17}$$

Con ambas tasas se tiene cual es la masa de hollín formada, pero existe una diferencia fundamental en cuanto a la aplicación de este método cuando se ha usado en nuestro caso. En nuestro caso no se ha usado la masa de combustible evaporado como especie precursora para calcular la masa de hollín, sino que se ha utilizado la masa de acetileno ( $C_2H_2$ ), al ser más consistente con las observaciones referidas a su composición [11]. El acetileno tiene su origen en la descomposición y recomposición del combustible durante las diferentes reacciones que se dan durante la combustión. Por ello tiene también más sentido que sea en puntos posteriores a la combustión donde se forma el hollín, y no con el combustible evaporado, el cual se tiene incluso en zonas precedentes al inicio de la llama.

Este método será el finalmente utilizado para hacer un modelado empírico de los casos se han de llevar a cabo. Aunque los modelos empíricos no sean modelos de características predictivas, son los actualmente usados en la industria (especialmente por su bajo coste computacional), a pesar de la necesidad de una calibración inicial antes de realizar las simulaciones, lo que implica la construcción de prototipos y poca seguridad en los resultados obtenidos con el cambio de condiciones.

### 2.4.2 Modelos fenomenológicos

En la actualidad ya no existen únicamente normativas en lo referente a la masa producida del hollín para la clase de motores objeto de este estudio, sino que también se han introducido, desde 2011 para motores Diesel de turismos y desde 2016 para motores de gasolina, límites en lo referente al número de

partículas emitidas [15]. El uso de modelos fenomenológicos responde de esta manera a la necesidad de modelar no solo la cantidad de hollín en masa sino también su cantidad en número de partículas.

Los modelos fenomenológicos o semi-empíricos dividen la producción del hollín en diferentes pasos. Este aumento en el nivel de detalle de la descripción de los procesos que componen la producción del hollín permite una mayor definición también en los resultados conseguidos, y una mayor independencia de la calibración para conseguir resultados satisfactorios. El incremento en este nivel de detalle supone incorporar procesos químicos y físicos a la formación del hollín, los cuales buscan aproximar el proceso mediante descripciones simples de la química o de la física implicada [11]. Con ello lo que se intenta es desprestigiar ciertos aspectos del flujo o de la combustión que fuerzan una resolución demasiado complicada como para llevarla a cabo de una manera eficiente, o que tienen demasiadas dependencias de diferentes variables para su resolución. Este tipo de suposiciones pueden provocar que las predicciones no se ajusten a la realidad, por lo que es necesario hacer las simplificaciones oportunas para que afecten lo mínimo posible a los resultados obtenidos.

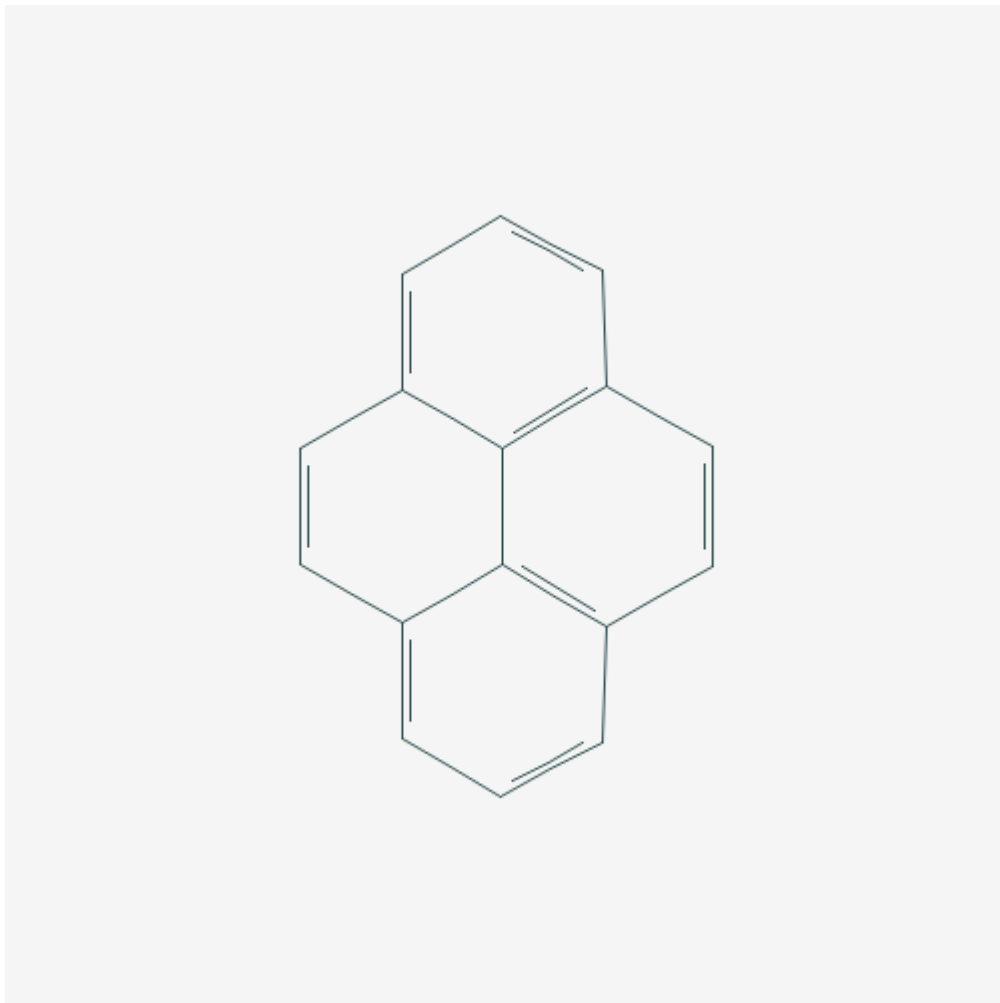
No solo es necesario tener en cuenta que simplificaciones se van a hacer sobre los procesos físico-químicos implicados, sino que además es necesario definir cuáles van a ser esos fenómenos. No hay establecido un conjunto de mecanismos únicos que conforman el proceso del modelado de partículas de hollín y, además, no lo está tampoco la forma en la que se dan esos mecanismos. Con ello se han ido sucediendo diversos modelos que han pretendido obtener un modelo cada vez más fiable, generalista y predictivo, aun apoyándose en datos empíricos, y con ello tener herramientas de cálculo que no tengan un coste computacional demasiado alto, de manera que no sea prohibitivo su uso. De éstos el elegido para realizar nuestras simulaciones y además, probar su validez, es el método desarrollado por Gokul y Reitz [16].

#### *2.4.2.1 Modelo Gokul*

Dicho modelo está basado en otros modelos de hollín semi-empíricos, como son el de Leung [17] para la formación de hollín, y el modelo de Nagle y

Strickland-Constable [14] para la oxidación del mismo, pero con diferencias respecto a los mismos.

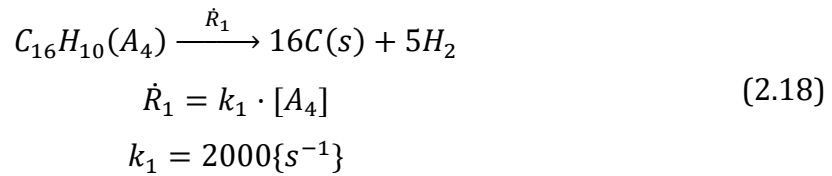
En primer lugar, el precursor elegido en este caso para la formación es el pireno o A4 ( $C_{16}H_{10}$ ), un PAH como se observa en la Figura 2.5, de tamaño considerable, al contrario que el acetileno usado en el modelo de Leung [17]. Esto se hizo debido a que en la necesidad de modelar inyección Diesel con la tecnología *Exhaust gas recirculation*, en la que parte de los gases de combustión se recirculan para bajar el porcentaje de oxígeno del aire de mezcla. Esta tecnología fue cogiendo protagonismo hasta llegar a la obligatoriedad. Y es que se había observado que en el caso de combustión en cilindros con menores concentraciones de oxígeno, las partículas de PAH más pequeñas, no crecían hasta convertirse en hollín [16].



*Figura 2.5 Estructura del pireno [18]*

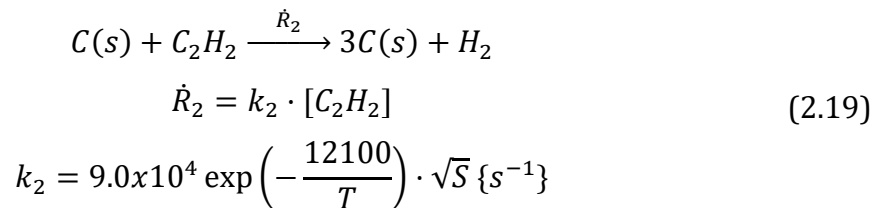
Otra de las diferencias es que en éste caso la oxidación no se considera únicamente producida por el oxígeno molecular ( $O_2$ ), sino que también se tiene en cuenta la oxidación por medio del hidróxido ( $OH\cdot$ ), usando para su cálculo el modelo propuesto por Fenimore y Jones [19]. Ambos componen las dos especies de uso más extendido para el modelado de la oxidación de hollín [20].

Finalmente, en este modelo, los diferentes mecanismos presentes son la nucleación, el crecimiento, la coagulación y la oxidación. El primero de ellos como se ha mencionado anteriormente tiene como precursor el pireno, al cual se le supone una descomposición en carbono sólido y moléculas de hidrógeno. El ratio viene modelado mediante la siguiente correlación.



En este caso el pireno está expresado en concentración molar ( $\text{mol cm}^{-3}$ ).

El siguiente proceso es el de crecimiento. En este caso el crecimiento de las partículas de hollín se debe a la incorporación sobre los núcleos formados de moléculas de acetileno. En este caso se tiene una expresión para modelar el ratio de reacción con el acetileno, y otra para el aumento de la superficie usando la densidad del carbono y suponiendo una forma esférica de las partículas formadas. Para la incorporación del acetileno es



Donde nuevamente la especie implicada, el acetileno en este caso, está en concentración molar ( $\text{mol cm}^{-3}$ ), y la temperatura T en Kelvin.



Para la superficie de las partículas por unidad de volumen, S, la expresión es

$$S = \pi d_p^2 N \quad \{cm^{-1}\}$$

$$d_p = \left( \frac{6Y_{C(s)}\rho}{\pi\rho_{C(s)}N} \right)^{1/3} \quad \{cm\} \quad (2.20)$$

Ésta depende del tamaño de las partículas  $d_p$ , el cual es función de la fracción másica de hollín  $Y_{C(s)}$ , la densidad del ambiente  $\rho$ , la densidad del hollín, supuesta igual que la del grafito (2.0 g cm<sup>-3</sup>), y la densidad numérica de hollín en partículas/cm<sup>3</sup>.

El tercer proceso es el de coagulación, por el que diferentes partículas de hollín se unen para formar partículas de hollín mayores, esto se hará a través de una constante de aglomeración, y hará que el número final de partículas de hollín disminuya respecto al inicial nucleado.

$$nC(s) \xrightarrow{\dot{R}_3} C(s)_n$$

$$\dot{R}_3 = K(T) \cdot \left[ \frac{\rho \cdot Y_{C(s)}}{M_{C(s)}} \right]^{1/6} \cdot [N]^{11/6} \quad (2.21)$$

$$K(T) = 2C_a \left( \frac{6 \cdot M_{C(s)}}{\pi \cdot \rho_{C(s)}} \right)^{1/6} \cdot \left( \frac{6 \cdot K_{bc} \cdot T}{\rho_{C(s)}} \right)^{1/2} \quad \{partículas \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}\}$$

Aquí,  $M_{C(s)}$  es el peso molecular del carbon en g/mol y  $K_{bc}$  la constante de Boltzmann (1.38054 · 10<sup>-16</sup> erg K<sup>-1</sup>).  $C_a$  es la ya mencionada constante de aglomeración, cuyo valor suele ser de 9.0.

El último de los procesos es el de oxidación, el cual se produce de dos maneras diferentes, tanto por medio del oxígeno como por medio del OH. En el caso de la oxidación por medio del O<sub>2</sub> no se usan exactamente las mismas expresiones que cuando se aplica el modelo NSC [14] en el caso Hiroyasu-NSC, ya que en este caso el resultado buscado es el ratio en concentración molar por

superficie, y no másica. También los valores de las constantes propias del modelo se han cambiado al revisarse para adecuar los resultados obtenidos [16]. El ratio en éste caso se define como

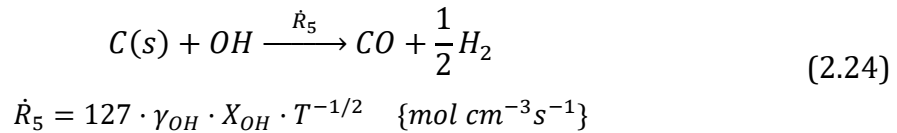
$$C(s) + \frac{1}{2} O_2 \xrightarrow{\dot{R}_4} CO$$

$$\dot{R}_4 = \frac{12}{M_{C(s)}} \cdot \left( \left( \frac{K_A \cdot P_{O_2}}{1 + K_T \cdot P_{O_2}} \right) \cdot X + K_B \cdot P_{O_2} \cdot (1 - X) \right) \cdot S \{mol\ cm^{-3}\ s^{-1}\} \quad (2.22)$$

En este caso los valores de las variables implicadas son los mismos que en las expresiones 2.15 y 2.16, añadiendo  $M_{C(s)}$  cuyas unidades son g/mol. Las constantes pasan a ser ahora

$$\begin{aligned} K_A &= 30.0 \exp(-15800/T) && \{g/cm^2 s^1 atm^1\} \\ K_B &= 8.0 \times 10^{-3} \exp(-7640/T) && \{g/cm^2 s^1 atm^1\} \\ K_T &= 1.51 \times 10^5 \exp(-49800/T) && \{g/cm^2 s^1\} \\ K_Z &= 27.0 \exp(3000/T) && \{1/atm\} \end{aligned} \quad (2.23)$$

La oxidación por medio del hidróxido ese hace según la siguiente relación



Donde  $\gamma_{OH}$ , la eficiencia de collision, tiene un valor de 0.13, valor obtenido experimentalmente por Neoh, Howard y Sarofim [21].

Con todos estos ratios se obtiene el término fuente del hollín formado, el cual podrá obtenerse tanto en densidad de hollín ( $\rho \cdot Y_{C(s)}$ ) como en densidad numérica (N).

La expresión para la densidad de hollín es la siguiente

$$\dot{S}_M = (16\dot{R}_1 + 2\dot{R}_2 - \dot{R}_4 - \dot{R}_5) \cdot M_{C(s)} \quad \{gcm^{-3}\ s^{-1}\} \quad (2.25)$$

Y para la densidad numérica

$$\dot{S}_M = \left( 16\dot{R}_1 \cdot \frac{M_{C(s)}}{M_{nuci}} - \dot{R}_3 \right) \cdot M_{C(s)} \quad \{\text{partículas cm}^{-3}\text{s}^{-1}\} \quad (2.26)$$
$$M_{nuci} = \frac{\pi}{6} \cdot d_{nuci}^3 \cdot \rho_{C(s)}$$

Donde  $M_{nuci}$  es la masa de los núcleos de hollín supuesto un diámetro de los mismos de  $d_{nuci}=1.28$  nm, que equivale a unos 100 átomos de carbono.

$\dot{S}_M$  supone el término fuente de la ecuación de transporte 2.10, que se resuelve para el hollín tanto para densidad o densidad numérica como variables.

### 2.4.3 Modelos detallados

Estos modelos establecen relaciones lo mas detalladas posibles para resolver la química implicada en la formación de hollín, añadiendo mas pasos a dicho fenómeno tratando de tener en cuenta todos los procesos intermedios posibles.

Estos métodos son los menos dependientes de posibles simplificaciones realizadas, y los que presentan una mayor consistencia al cambiar la situación de aplicación, tanto en la geometría, como en las condiciones ambientales, como con el combustible.

En la actualidad, el alto coste computacional asociado a estos modelos limita el uso de los mismos. Por ello, no tienen un desarrollo actual de aplicación industrial. Eso hace que no se encuentren incluidos de forma extensiva en los diferentes programas utilizados en la industria. Por esa razón no son objeto de estudio en el presente documento.

# Capítulo 3

## Metodología y equipos

### **3.1 Introducción**

En el siguiente capítulo se explica la metodología utilizada para la realización de las diferentes simulaciones, su post-procesado, y su verificación. Se especificarán los softwares y procedimientos llevados a cabo, y se indicarán los ensayos simulados.

Es necesario especificar cuáles son los datos y la información a obtener y, de esta manera, entender el análisis que se quiere llevar a cabo.

### 3.2 Casos objeto de la simulación

Los casos a simular se corresponden con algunos de los casos de ensayo propios de la *Engine Combustion Network*. Dicha entidad consiste en una red de laboratorios pertenecientes a diferentes organizaciones, empresas y universidades. En ellos, se realizan una serie de ensayos con las mismas condiciones y se comparten los datos experimentales obtenidos. Con ello, lo que se busca es tener una base de datos extensa con la que realizar comparaciones y así mejorar distintas técnicas de aplicación. Principalmente, se busca el desarrollo de técnicas ópticas para obtención de medidas experimentales y, por otra parte, contar con una base experimental con la que contrastar resultados obtenidos mediante simulaciones. En última instancia, la comparación entre medidas experimentales y herramientas de modelado permitirá mejorar estas últimas, lo cual ayudará al diseño de motores más eficientes y menos contaminantes.

Las medidas son propias de procesos acordes a los que se desarrollan dentro de las diferentes clases de motores de combustión, teniendo una tipología de ensayo por cada uno de los tipos principales de motor.

Estos ensayos suponen la simplificación del proceso que se lleva a cabo en un motor de combustión, quedando solamente una parte fundamental del mismo. Si bien la inyección y combustión que se produce en motores, se lleva a cabo de manera múltiple mediante varios orificios de inyección y la combustión simultánea de varios chorros de combustible, el ensayo es de sólo un inyector con un solo orificio, provocando la combustión de un único chorro de combustible. Se produce la combustión de dicho chorro en un cilindro lo suficientemente grande para evitar el choque con las paredes del mismo, con una atmósfera en condiciones propias del tipo de motor específico en estado de reposo.

Los casos simulados se corresponden con algunos de los que se llevan a cabo en dos tipos de motores, los conocidos como *light duty* y *heavy duty*, correspondientes respectivamente a motores de poca potencia, propios de

turismos, y de gran potencia, propios de vehículos de transporte de mercancías. Estos casos son el Spray A y el Spray D respectivamente.

Las condiciones del caso nominal simulado, se corresponden con condiciones de operación típicas de un motor de encendido por compresión. Éstas vienen resumidas en las siguientes tablas en cuanto a condiciones termodinámicas y de inyección.

*Tabla 3.1 Condiciones de inyección del Spray A*

Combustible	n-dodecano
Presión de inyección	150 MPa
Temperatura del combustible	363 K

*Tabla 3.2 Condiciones termodinámicas del Spray A*

Temperatura ambiente	900 K
Densidad ambiente	22.8 kg/m <sup>3</sup>
Fracción volumétrica de oxígeno	$X_{O_2} = 0.15$

Estas condiciones se corresponden con las condiciones de motor normales de los tipos de motor antes mencionados. En cuanto a las condiciones geométricas de las simulaciones, dependerán del caso de la ECN que se esté simulando, si Spray A o Spray D, ya que cambiará el tamaño de la tobera y también del chorro inyectado, teniendo que cambiar el tamaño del volumen que lo contiene. Además, se realizarán también variaciones en las condiciones termodinámicas que se explicarán en el siguiente capítulo.

## **3.3 Software**

En este apartado hay que diferenciar entre tres diferentes softwares utilizados, uno para la preparación de los casos, otro para el cálculo de los mismos y un último para el post-procesado y presentación de los resultados obtenidos.

### **3.3.1 CONVERGE**

Los dos primeros se pueden agrupar dentro de un mismo bloque, ya que, aunque se trate de dos programas diferentes el primero supone desde donde se lanza el segundo. Esto es, no se utilizan de manera independiente, al menos en nuestro caso. Los programas son el CONVERGE Studio, y el CONVERGE CFD.

En el primero de ellos se puede seleccionar desde una plataforma sencilla cuales son los parámetros de la simulación. En éste se puede definir o importar una geometría, seleccionar los modelos a aplicar, y las condiciones de la simulación en general. Éste pasa esta información al segundo generando una serie de ficheros que supondrán la información de la que dispone para hacer los cálculos.

Los ficheros mencionados se pueden editar directamente sin la necesidad de usar CONVERGE Studio, pero no se ha procedido de esa manera habitualmente durante la preparación de las simulaciones en este caso, intentando que todo quede definido adecuadamente desde la interfaz de CONVERGE Studio.

### **3.3.2 MATLAB**

Una vez resueltos los cálculos mediante las ecuaciones y modelos indicados en el capítulo 2, se obtienen valores para las distintas variables que se desean conseguir.

Los resultados obtenidos, normalmente forman grandes grupos de datos que no dan una información relevante si no son procesados y representados de manera adecuada. Esto ha hecho necesario que se hallan desarrollado por nuestra parte rutinas de post-procesado debido a la necesidad de la correcta



consecución y presentación de los datos. Dichas rutinas se han desarrollado en lenguaje MATLAB.

### **3.4 Equipos**

Para la realización de este trabajo se ha hecho uso de diferentes equipos, cada uno con su función específica.

El primero de ellos es el ordenador personal desde el cual se ha realizado el trabajo, el cual consiste en una estación de trabajo de sobremesa. El segundo es la máquina del laboratorio desde la cual se han llevado a cabo los distintos post-procesados que han sido necesarios, cual cuenta con 32 procesadores. Y, por último, la red de computación RIGEL de la UPV, donde se realizan los cálculos de las simulaciones llevadas a cabo, cuyo clúster general cuenta con 144 procesadores Intel Xeon E5-2450 8c/16T.

### **3.5 Metodología**

Durante el desarrollo de este trabajo se busca probar la validez de un modelo fenomenológico de producción de hollín. Para ello se comparan los valores obtenidos desde la simulación con los valores obtenidos desde la experimentación.

Las simulaciones se han realizado sobre casos genéricos que suponen los casos de estudio propios de la *Engine Combustion Network*, de la cual el Instituto Universitario CMT-Motores Térmicos de la UPV forma parte. Con ello se cuenta con una base de datos sólida y contrastada con la que comparar. Los casos genéricos coinciden con diseños estándares dentro de la industria, siendo equivalentes y aplicables a situaciones que se dan en los motores de encendido por compresión. Los datos experimentales obtenidos se encuentran disponibles en la página web del ECN, o se encuentran a disposición para la realización del proyecto en el CMT.

Los diseños de las simulaciones se tratan, por lo tanto, de casos estandarizados, con diseños similares a los de las instalaciones donde se realiza la experimentación.

Los diseños de los casos no solo imitan las condiciones que se pueden encontrar en motores, sino que también cuentan con la inyección propia de los tipos de motores más utilizados, usándose en este caso los propios de los motores de turismos (Spray A) y de camiones (Spray D). Los cuales se diferencian en el diámetro de la tobera y en la cantidad de combustible inyectado, además de contar con una geometría diferente del volumen en el que se desarrolla el chorro.

### 3.5.1 Preparación de los casos

El diseño se hace en el ya mencionado CONVERGE Studio, inicialmente definiendo la geometría y condiciones de la inyección (Figura 3.1). Posteriormente se seleccionan aspectos concretos de la física y de la química del chorro, como la ley de modelación de los gases, parámetros de las ecuaciones de transporte y el mecanismo químico seguido.

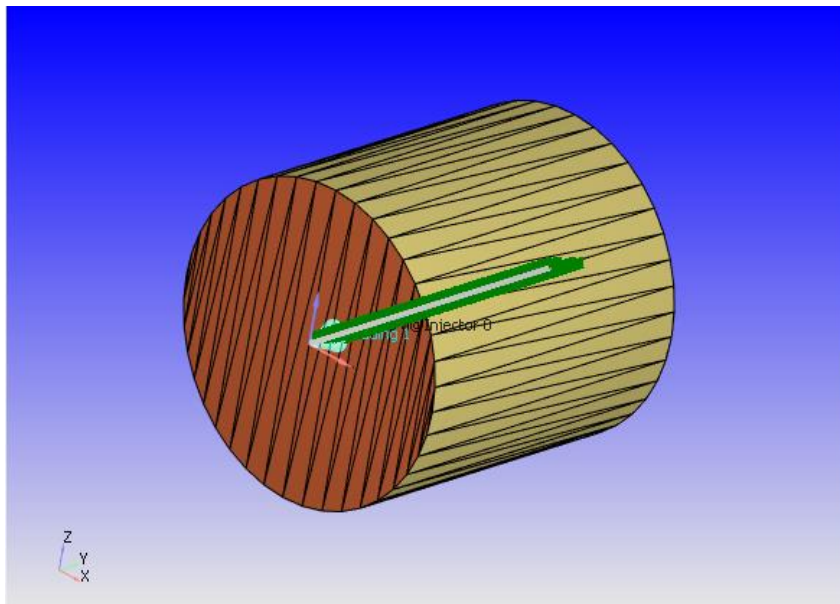


Figura 3.1 Geometría del caso Spray A

#### 3.5.1.1 Parámetros físico-químicos

En cuanto al modelado de gases se puede seleccionar tanto la ley de los gases ideales como diferentes correlaciones, pero en nuestro caso se seleccionará

siempre la ecuación de los gases ideales en la ventana correspondiente (Figura 3.2) modelada por la ecuación 2.9.

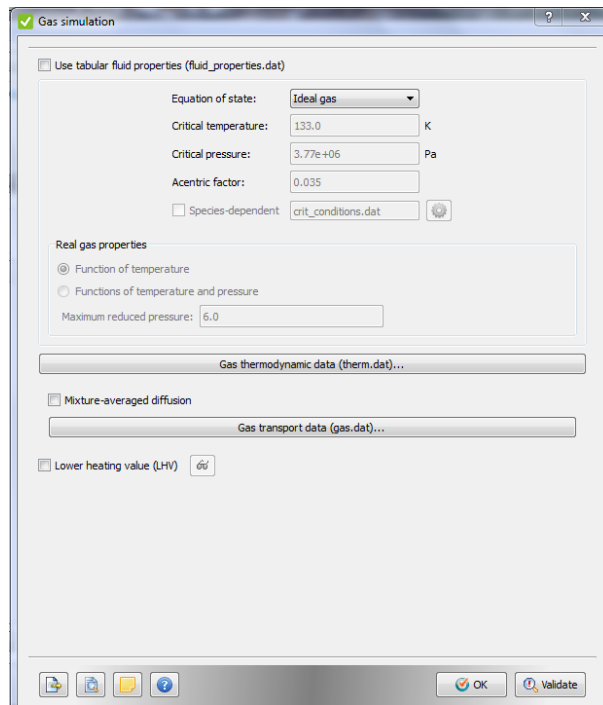


Figura 3.2 Menú de elección de simulación del gas

Una vez seleccionado el modelado del gas se pasa a elecciones referentes a la fase líquida. En ella se elige la especie presente en la misma, así como una tabla con propiedades de la misma en función de la temperatura, como se ve en la siguiente figura.

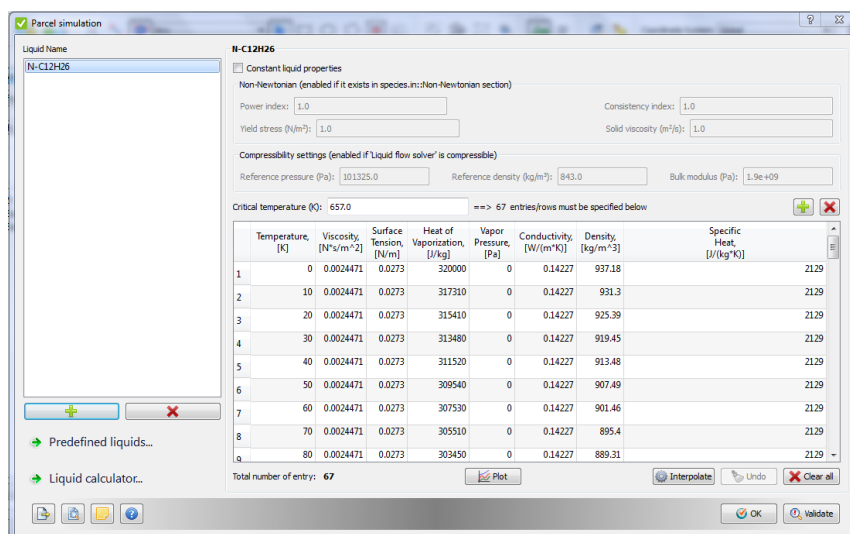


Figura 3.3 Condiciones del líquido en los paquetes

A continuación, para seguir con el apartado de propiedades físico-químicas se selecciona cual es el mecanismo químico a seguir, especificando todas las especies involucradas, y todas las reacciones que las relacionan (Figura 3.4). En nuestro caso se especifica el mecanismo desarrollado por Narayanaswamy, Pepiot y Pitsch [10].

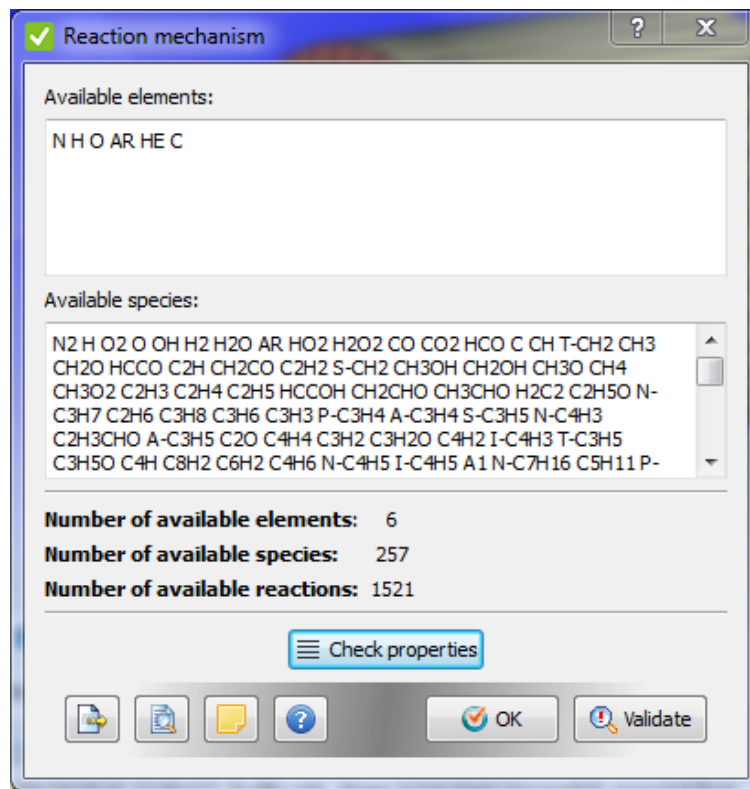


Figura 3.4 Especificación del mecanismo químico

Finalmente, se eligen parámetros relacionados con los valores de los términos difusivos de las ecuaciones de transporte implicadas en el desarrollo del flujo, necesarios al añadir un modelo de turbulencia (Figura 3.5).

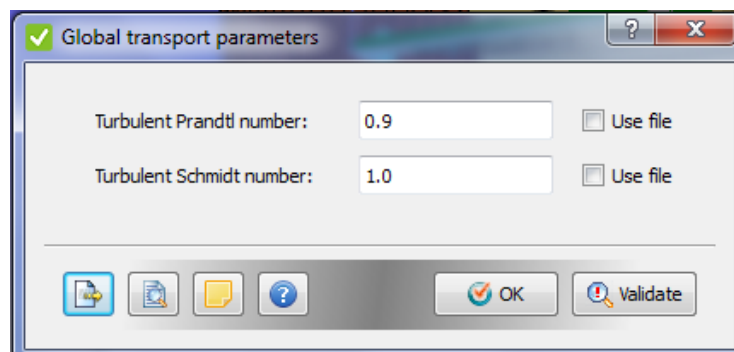


Figura 3.5 Parámetros globales de las ecuaciones de transporte.

Éstos son valores asociados concretamente a las ecuaciones de transporte de especie y energía respectivamente.

### 3.5.1.2 Parámetros de resolución numérica

La siguiente entrada se hace respecto a los parámetros que determinaran la realización del cálculo numérico por parte del programa. En los mismos se determina el tipo de resolución empleada en cada fase, que criterios de convergencia se usan, o con que pasos temporales se realizan los cálculos, así como el número de celdas en el que se produce un cambio en cada paso temporal (Figura 3.6).

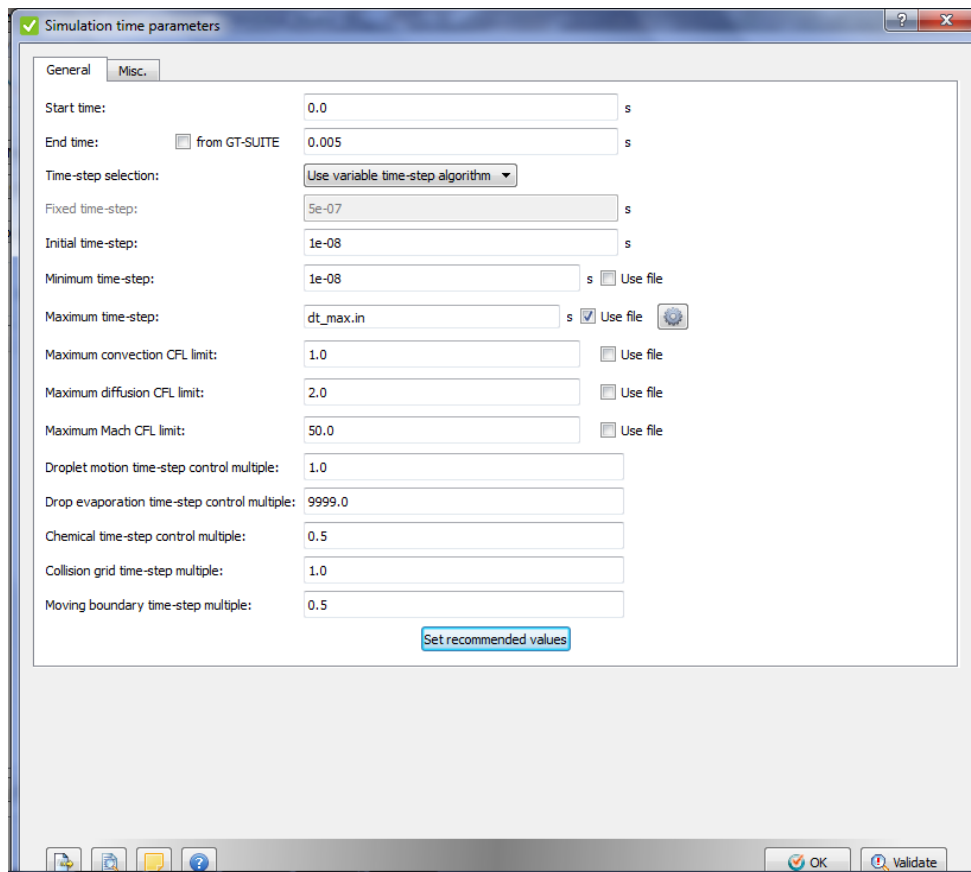


Figura 3.6 Parámetros temporales

El número de celdas en las que varía una magnitud en cada paso temporal viene determinado con el límite CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) el cual viene definido por la expresión

$$CFL_{\phi} = \phi \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (3.1)$$

Donde  $\phi$  se corresponde o bien con la velocidad  $u$ , o con la velocidad del sonido  $c$ . También puede ser con la viscosidad  $\nu$ , y en ese caso, el paso espacial estaría al cuadrado ( $\Delta x^2$ ).

### 3.5.1.3 Condiciones iniciales internas y de contorno

En estos apartados se definen variables de estado específicas del caso a resolver, al igual que composiciones iniciales, o supuestas en los límites del problema.

Las condiciones iniciales se definen a partir del menú *Regions and Initialization* (Figura 3.7), donde para la región del problema definido se describen unas condiciones iniciales de presión, temperatura y composición.

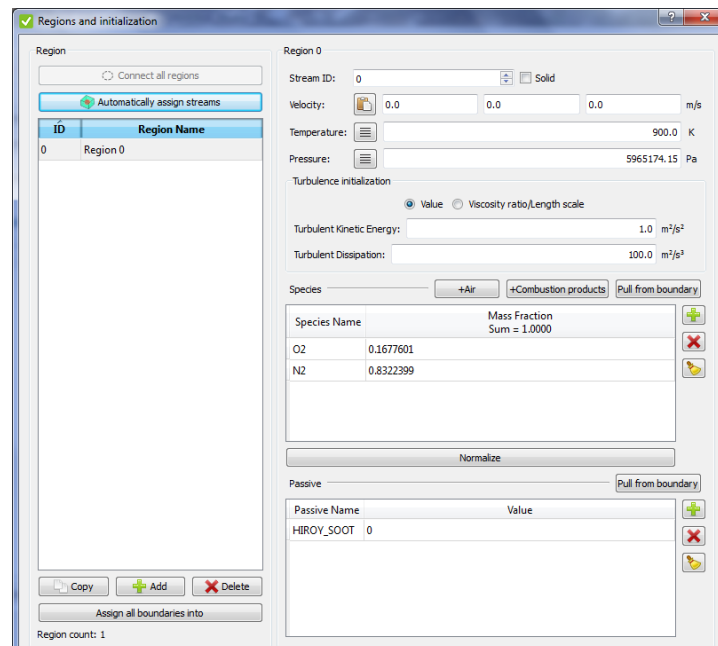


Figura 3.7 Definición de las condiciones iniciales.

En el apartado *boundaries* no solo se definirán las condiciones en los límites del problema, sino que, además, se especificará la clase de límites que suponen los mismos (Figura 3.8). Con ello se especifica si se trata de límites abiertos o cerrados. Se puede especificar qué clase de interacciones se dan con

dicho contorno, como la posible transferencia de materia, de calor, o rozamiento, según se trate de contornos abiertos o cerrados.

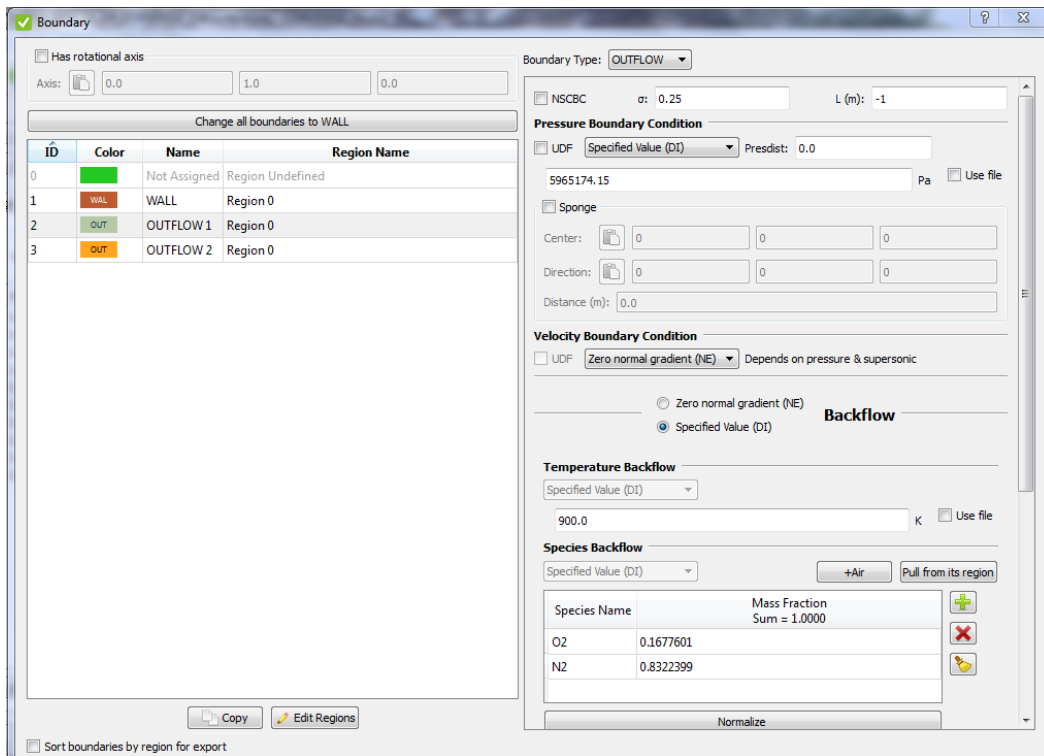


Figura 3.8 Definición de las condiciones de contorno

#### 3.5.1.4 Modelo de combustión

El modelo de combustión también cuenta con un apartado donde se selecciona el mismo. En él se especifica cual es el método a seguir para el cálculo del conjunto de reacciones químicas que se llevan a cabo. Las mismas están en función de parámetros físicos y cantidades de las especies en cada celda.

Como se especifica en el apartado 2.3.1, para todos los casos de las simulaciones llevadas a cabo se ha usado el modelo SAGE de resolución detallada de la química.

#### 3.5.1.5 Modelo de hollín

Dentro del apartado de emisiones, se pueden seleccionar los diferentes modelos aplicados al cálculo de los principales productos contaminantes, como son los óxidos de nitrógeno y el hollín.

Otros productos contaminantes, como el monóxido de carbono o los hidrocarburos sin quemar, se obtendrán directamente desde el modelado de la combustión, por lo que no necesitan de la aplicación de modelos adicionales.

En nuestro caso nos centramos en el modelado del hollín, el cual se hará según un modelo empírico y un modelo fenomenológico. Siendo la validez del segundo la que se quiere comprobar.

Para ambos casos se mantienen las constantes originales de los respectivos modelos, seleccionándolos en las ventanas que se pueden apreciar en las siguientes figuras, se manera que se pueda apreciar la extrapolación de los modelos, y por tanto su capacidad predictiva.

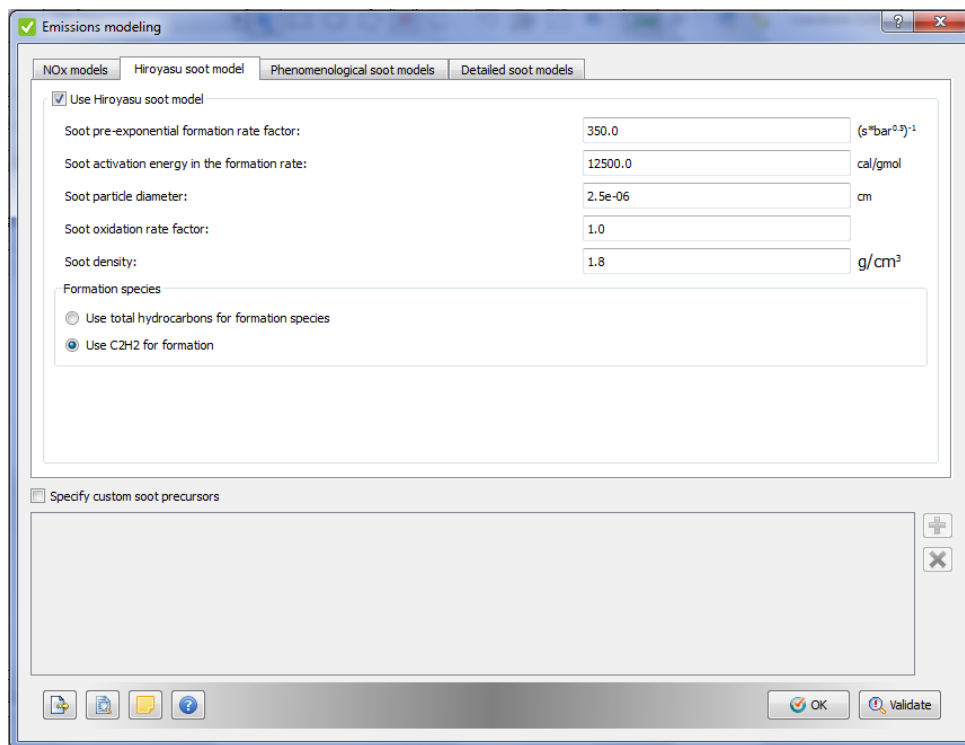


Figura 3.9 Selección de las constantes en el modelo Hiroyasu-NSC



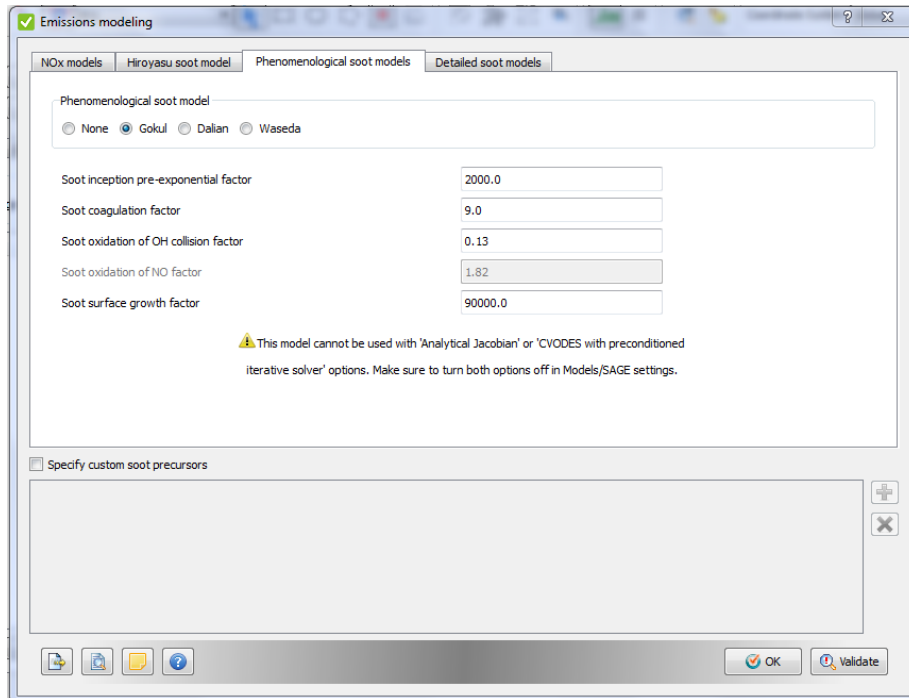


Figura 3.10 Selección de modelo fenomenológico y constantes correspondientes

### 3.5.1.6 Modelo de turbulencia

El modelo de turbulencia elegido para todos los casos es el modelo  $k-\varepsilon$ , usando siempre las constantes estándar del modelo. En este método se añaden dos variables, la energía cinética turbulenta y la disipación de la energía cinética turbulenta, con sus correspondientes ecuaciones de conservación. Con ellas se tendría un modelo en el que las magnitudes de las ecuaciones de conservación tienen un valor promediado y un valor fluctuante, que obtendrá su valor a partir de las nuevas ecuaciones introducidas, lo que se conoce con un modelo *Reynolds-Averaged Navier Stokes*, aunque en este caso se usa un modelo *Favre-Averaged Navier Stokes* para tener en cuenta los cambios en la densidad con la turbulencia.

### 3.5.1.7 Modelos en la inyección

El último de los aspectos físicos que modelar es el de los modelos referentes a los procesos que se dan desde la inyección de líquido hasta su evaporación. Éstos son los modelos concretos para la dispersión turbulenta de gotas, para su rotura, colisión y arrastre, y finalmente para su evaporación, especificándose todos dentro de la misma ventana (Figura 3.11).

**Dispersión turbulenta de las gotas:** Se puede optar por distintas posibilidades como no tener en cuenta dicha dispersión, usar un modelo TKE de preservación, y el utilizado por nosotros el modelo *O'Rourke*. Éste tendrá en cuenta la turbulencia de la fase gaseosa para interactuar con las gotas de líquido por medio de un término fuente relacionado con la fuerza de arrastre entre la fase gaseosa y la líquida [4].

**Arrastre:** Éste se puede tener en cuenta suponiendo una forma esférica perfecta de las gotas, o como en nuestro caso, teniendo en cuenta las variaciones en la forma de las gotas, usando para ello un parámetro de distorsión. Este modelo es el llamado *Dynamic drag model*.

**Rotura:** Para el modelado de este fenómeno se utilizan en conjunción dos modelos, el *Kelvin-Helmholtz* y el *Rayleigh-Taylor*. El primero se encargaría de modelar la atomización primaria mientras que el segundo haría lo propio con la atomización secundaria. El modelo *Kelvin-Helmholtz* modela las roturas de las gotas desde el chorro a través de las inestabilidades provocadas por la interacción entre el chorro líquido y la fase gaseosa. Por otro lado, el modelo *Rayleigh-Taylor* supone la rotura de las gotas debido a su rápido frenado debido al arrastre [4].

**Colisión y coalescencia:** La colisión de las gotas se modela atendiendo a distribuciones estadísticas además de relaciones físicas. Esto se debe a que el que suceda este fenómeno se asocia a la probabilidad de choque entre dos gotas, lo cual sigue una distribución de Poisson. En nuestro caso, en cambio, no se usa dicha distribución, ya que el modelo elegido usa otras formas de distribución de probabilidad. Se trata del método *No Time Counter (NTC)* con técnicas basadas en el método Monte Carlo [4].

**Evaporación:** Se deben seleccionar también el modelo para la evaporación. En el mismo, lo que se modela es la disminución de radio de las gotas debido al cambio de fase de las mismas. En nuestro caso se ha usado la correlación de *Frossling*.

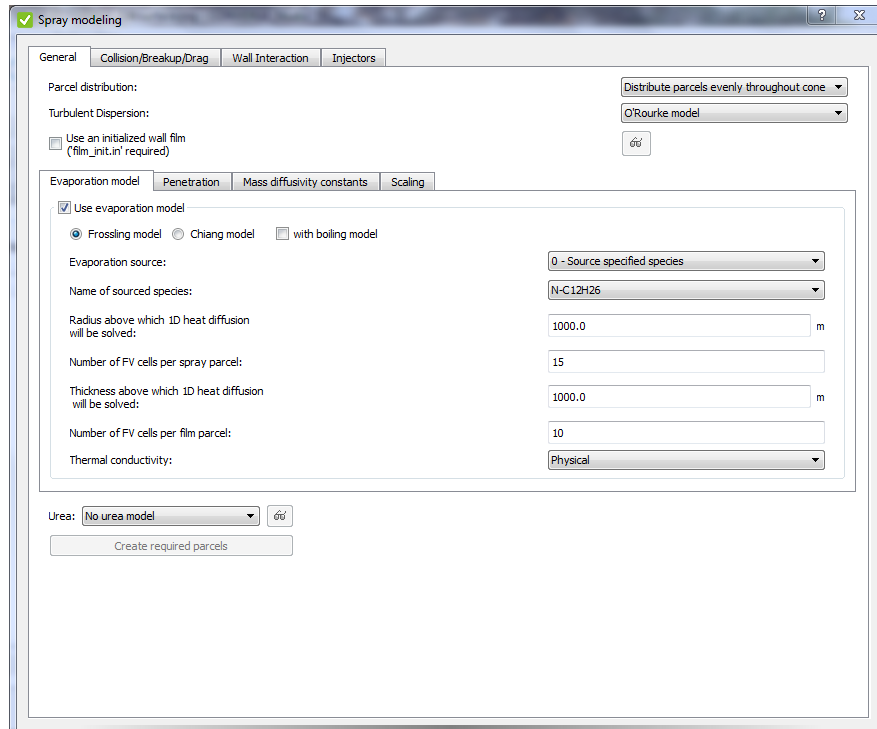


Figura 3.11 Menú de modelado de la inyección.

### 3.5.1.8 Mallado y obtención de datos

También es necesario indicar como se van a distribuir el tamaño de las celdas a lo largo del dominio. Con ello es necesario definir un tamaño base de la malla inicial, de cubos de 2 mm de lado.

Posteriormente, en nuestro caso, se han definido dos regiones para la construcción de la maya. La primera de todas en una región cónica alrededor de la tobera de inyección con un mallado fijo, ésta está definida con celdas de 250  $\mu\text{m}$  de lado en el caso del Spray A y 500  $\mu\text{m}$  de lado en el caso del Spray D. La segunda, consistente en el resto del volumen, cuenta con una malla adaptativa que cambia con los gradientes de velocidad, temperatura y especies (Figura 3.12), con una definición máxima con cubos de 125  $\mu\text{m}$  de lado en el caso del Spray A y 250  $\mu\text{m}$  de lado en el caso del Spray D, como tamaños mínimos.

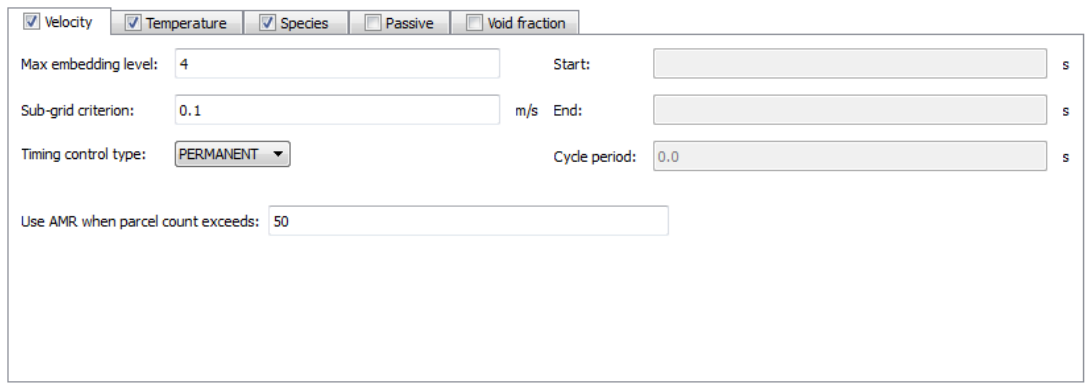


Figura 3.12 Selección de los parámetros de control del mallado adaptativo

Por último, es necesario definir cuáles son las variables que queremos que sean obtenidas para cada celda y para cada parcela de líquido. Se hace a través de un menú de selección como el de la siguiente figura.

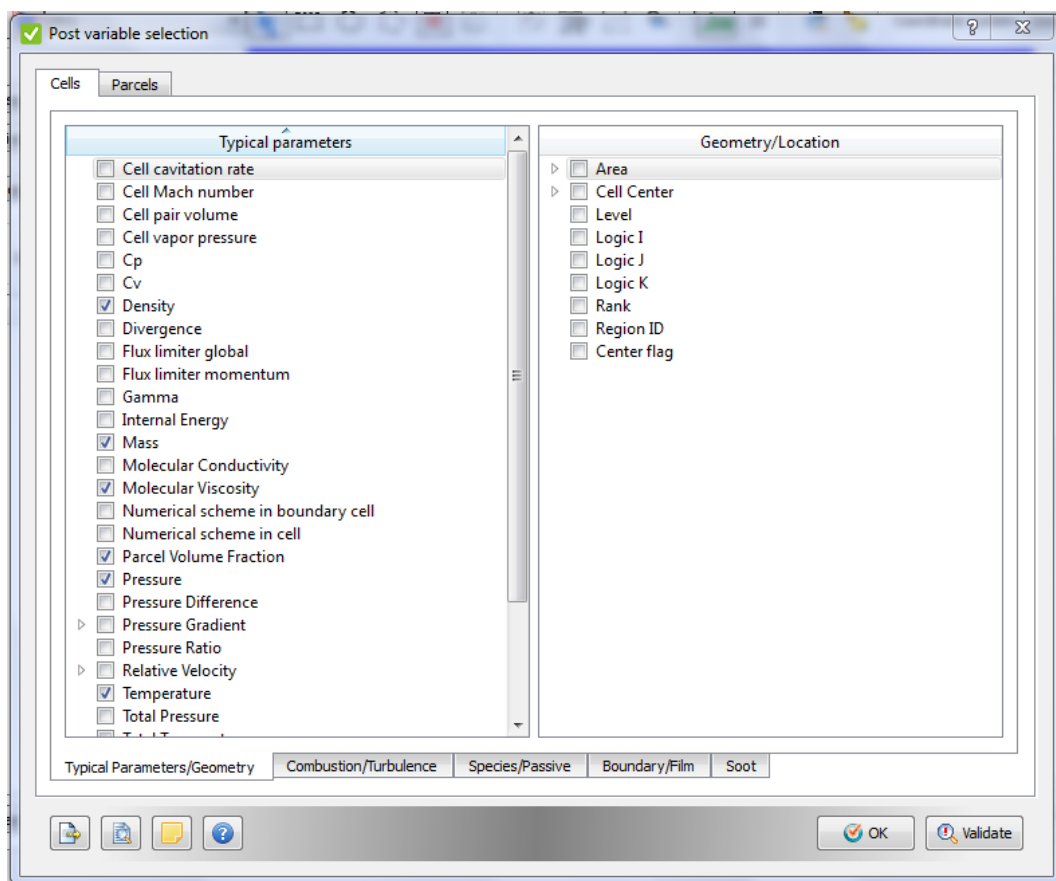


Figura 3.13 Selección de los datos a obtener

Con este último quedan definidos todos los ficheros que servirán de entrada al programa de cálculo, pudiéndose éste llevar a cabo.

### **3.5.2 Post-procesado de la información**

Una de las partes principales de este trabajo ha sido el desarrollo de rutinas de post-procesado de la información calculada por el programa CONVERGE CFD.

De la mucha información obtenida se ha puesto el foco sobre la referente a la producción de partículas de hollín. Se ha buscado obtener tanto información general de la producción de hollín, como sobre valores con distribución espacial.

En cuanto a información general se ha obtenido información sobre la masa de hollín formado, o la densidad numérica de las partículas de hollín. Ésta se obtiene directamente, en valores medios para todo el dominio, como un archivo de salida *emmissions.out*, como resultado de la configuración de los modelos de hollín tal y como se ha definido en el apartado 3.4.1.5.

Por otro lado, la información relativa a posiciones espaciales, es decir, la que se encuentra dentro de las celdas y los paquetes, se encuentra dentro de grandes grupos de datos con extensión *.col* o *.par*, respectivamente, habiendo un grupo para cada instante. Los archivos de ese tipo tienen que pasar por una rutina de post-procesado concreta que permita obtener la información necesaria de los mismos de manera adecuada. Además, se cuenta con la información relativa a la experimentación para poder realizar la validación de las simulaciones. Las bases de datos con la información necesaria o bien se encuentran dentro de la base de datos de la ECN o del mismo CMT. Finalmente, se han obtenido datos sobre otros aspectos de la combustión, para poder tener una mayor información y visión sobre las comparaciones con los datos experimentales.

En general, se ha contado con dos tipos de rutinas, las que obtienen los datos “crudos” de las simulaciones, y los pasan a los formatos que se puedan manejar para realizar cálculos y representaciones. Y, por otra parte, las rutinas que obtienen dichos datos, además de los datos de las experimentaciones, y realizan sobre ellos los cálculos y representaciones requeridos para el análisis.

# Capítulo 4

## Análisis de resultados

## **4.1 Introducción**

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en las simulaciones. Se comienza presentando los resultados para un caso nominal, es decir, que se encuentra en las condiciones de operación normales previstas en un motor de encendido por compresión. Una vez analizados los resultados obtenidos para este caso, se realizan variaciones en las condiciones de operación, para evaluar las capacidades predictivas del modelo. Finalmente se realiza un cambio, no de las condiciones si no de la tobera, para estudiar la influencia de este tipo de cambios de la geometría.

## 4.2 Caso nominal

Se inicia directamente con el caso nominal reactivo, ya que la validez del mismo en cuanto parámetros del chorro como la velocidad o la penetración, que hacen necesaria la comparación con un caso inerte, ya ha sido discutida en trabajos previos para este mismo caso.

Aun así, se han obtenido resultados más allá de los relacionados estrictamente con el hollín, para poder poner en valor las comparaciones entre resultados de simulación y resultados experimentales mediante otros aspectos del flujo y de la combustión.

El caso nominal se caracteriza por tener las condiciones de operación propias del motor Diesel, además de una geometría de la tobera similar. En cuanto a la geometría del cilindro sobre el que se desarrolla la simulación, tiene unas características similares a la del ensayo experimental.

Las características geométricas del Spray A vienen resumidas en la siguiente tabla.

*Tabla 4.1 Geometría del Spray A*

Diámetro de la tobera	89.4 $\mu m$
Diámetro del cilindro	100 mm
Longitud del cilindro	102 mm

Por otro lado, las condiciones termodinámicas y de inyección son las especificadas en el apartado 3.2, propias de las condiciones nominales.

Tras preparar el caso especificando, dichas características y condiciones, además de definir los modelos especificados en el capítulo 3, obtenemos los resultados susceptibles de comparación con el caso de la ECN del Spray A reactivo en condiciones nominales.



### 4.2.1 Ignition delay

Iniciamos con los resultados obtenidos para el *ignition delay* (ID), concepto desarrollado en el apartado 2.3. Para calcular este parámetro la guía del ECN especifica que el mismo se defina como el momento en el que la derivada de la temperatura máxima en el dominio alcance un máximo en el tiempo de simulación. Con este dato, se puede analizar si existe relación entre los tiempos de retraso de autoencendido que puedan explicar diferencias en los resultados obtenidos en relación a la producción del hollín.

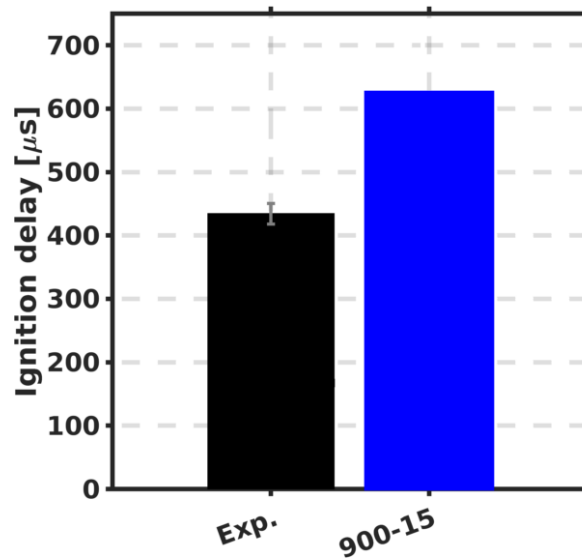


Figura 4.1 ID del Spray A nominal

En la figura (Figura 4.1) se puede observar que en la simulación encontramos un ID mayor que el observado en la experimentación, lo cual es algo que se ha visto que depende fundamentalmente del mecanismo químico elegido [22].

### 4.2.2 Lift-off length

Dicho concepto también se explica en el apartado 2.3, con este parámetro podemos observar las diferencias en la zona de estabilización de la llama, lo cual puede dar información sobre la posición de esta con respecto a la observada en la experimentación. Este parámetro es de especial importancia, ya que un mayor o menor LOL puede hacer que se haya englobado más o menos aire por parte del

chorro hasta el inicio del autoencendido. Con ello, las variaciones en el dosado con el que se produce el autoencendido afectarán a la cantidad de hollín producido, produciendo mas cantidad cuanto mayor sea dicho dosado.

Según los criterios guía del ECN este parámetro se calcula como el punto en el que la concentración de OH sea el 14% de la concentración máxima de OH en todo el dominio para cada instante de tiempo. Obteniendo así los datos representados en la siguiente figura como el LOL una vez estabilizada la llama.

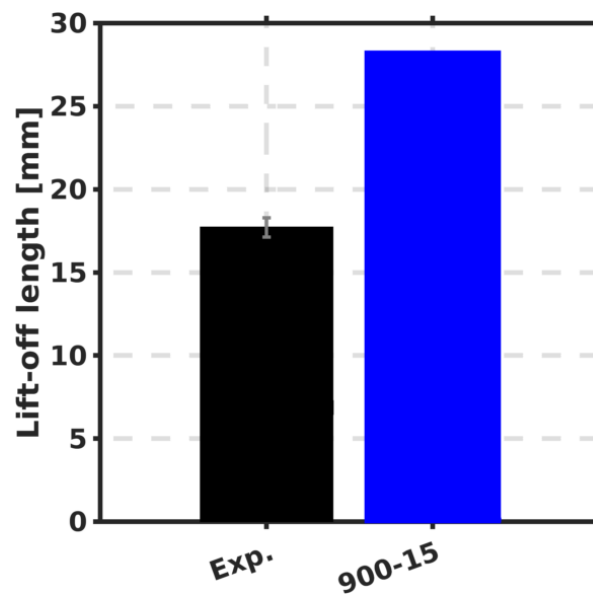


Figura 4.2 LOL del Spray A nominal

Podemos observar, tal y como era de suponer tras la observación de las diferencias en el ID, que, teniendo un retraso en el tiempo de autoencendido con respecto al experimento, también ese encendido se produce aguas abajo del encendido del caso experimental.

### 4.2.3 Penetración del chorro

En este caso se puede ver la equivalencia con la penetración del chorro de vapor, que según el criterio del ECN el extremo del mismo está donde el valor de la fracción de mezcla tenga un valor del 0,1%. También es una medida de la posición relativa de la región que engloba el chorro en el caso simulado respecto al ensayado. Con ella se busca explicar las posibles diferencias en los resultados

obtenidos del hollín con la simulación, y los obtenidos de las imágenes obtenidas durante los ensayos experimentales.

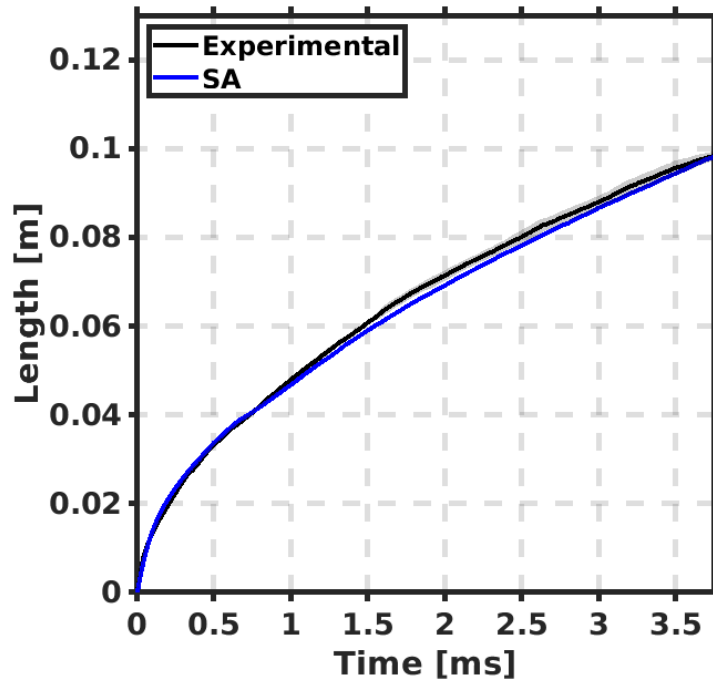


Figura 4.3 Penetración del chorro del Spray A nominal

Se puede observar que la penetración durante la simulación coincide con bastante exactitud respecto a la obtenida durante la experimentación (Figura 4.3). El resultado de la simulación coincide con el resultado experimental al comienzo y al término de la misma, inicialmente debido a que se trata de un chorro inerte, y posteriormente debido a la estabilización del mismo. El resto del tiempo se encuentra o dentro del intervalo de confianza de los datos experimentales o ligeramente por debajo. Esto indica que el extremo de los chorros experimental y simulado se corresponden en el tiempo, con un ligero retraso del caso simulado en algunos instantes.

#### 4.2.4 Masa de hollín

La masa de hollín obtenida de la simulación, consiste en la suma de la masa de hollín total que se encuentra a cada instante dentro de una región de interés (ROI por sus siglas en inglés). Dicha región, viene delimitada por el tamaño de la ventana de la instalación experimental, consiguiendo así que los resultados de la

simulación sean susceptibles de comparación. En resumen, de toda la masa de hollín presente en el chorro durante cada instante de la simulación, sólo se tendrá en cuenta la masa presente en la misma zona en la que se podrían hacer las mediciones experimentales. Con ello se facilitaría la comparación entre ambos grupos de datos, siendo aún posible la aparición de errores debidos al decalaje entre la posición de las llamas para un mismo instante.

Existen dos regiones de interés definidas para el procesamiento de los datos, una que se ajuste a la ventana de visión de la instalación del *Sandia National Laboratories* y otro que se ajuste a la de la instalación del CMT-UPV.

Las primeras simulaciones conseguidas son las obtenidas por medio del modelo empírico antes descrito *Hiroyasu-NSC*, inicialmente los resultados obtenidos no se corresponden con los ensayos, al usar las constantes por defecto del modelo (Figura 4.4), pudiéndose todavía ajustar las constantes del modelo mediante los mismos datos experimentales.

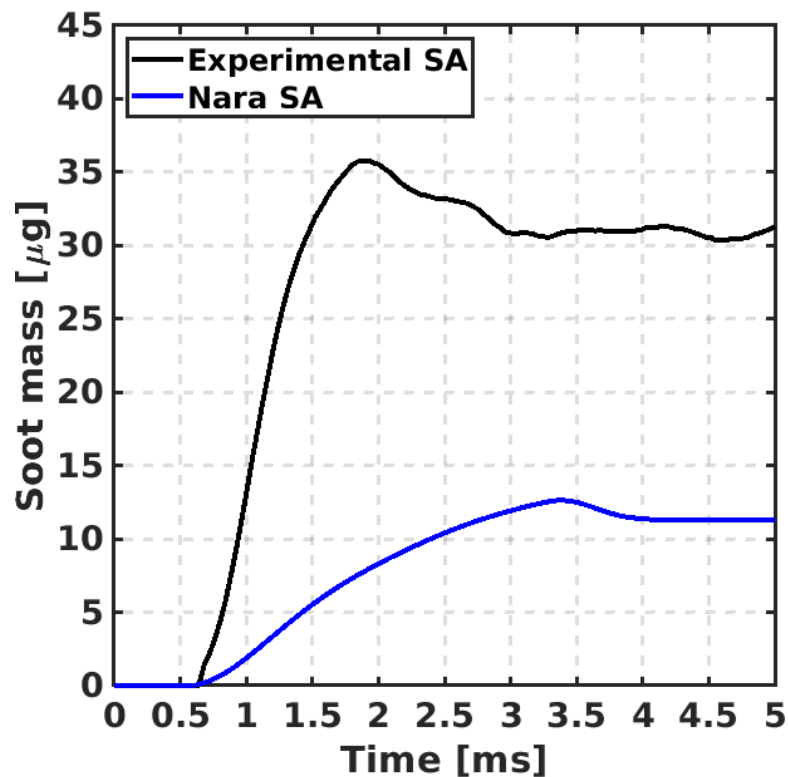


Figura 4.4 Evolución de la masa de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo *Hiroyasu-NSC* en el *Spray A* nominal

Como se puede observar, los datos obtenidos no son satisfactorios, siendo necesaria la calibración del modelo. Esta calibración se realiza sencillamente escalando la constante de formación del modelo,  $A_f$  de la ecuación 2.12, de manera que los valores de la simulación se correspondan con los de los ensayos. En concreto se escala para que se correspondan los valores del intervalo de la combustión en el que se considera que se ha superado el transitorio del proceso. Realizándolo de esta manera los valores quedan como se presentan en la siguiente figura.

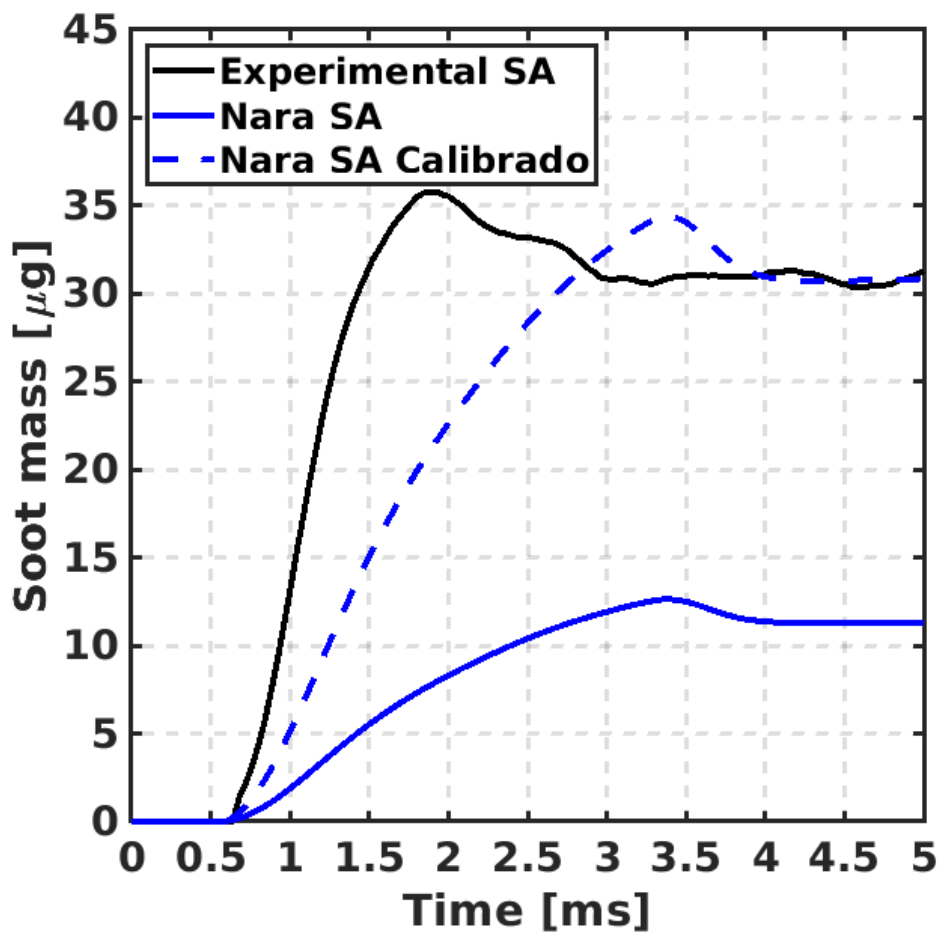


Figura 4.5 Evolución de la masa de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Hiroyasu-NSC calibrado y sin calibrar en el Spray A nominal

Una vez calibrado se obtienen valores acordes con los vistos en la experimentación, pero será necesario comprobar si este mismo escalado se

adecúa para los diferentes casos cuya simulación se va a llevar a cabo. En concreto se multiplicó la constante original del modelo por el valor 2,724.

A continuación, presentan los resultados de la simulación con el modelo Gokul (Figura 4.6), utilizando las constantes originales del modelo, las cuales fueron ajustadas por los autores del modelo para un caso similar al ensayado.

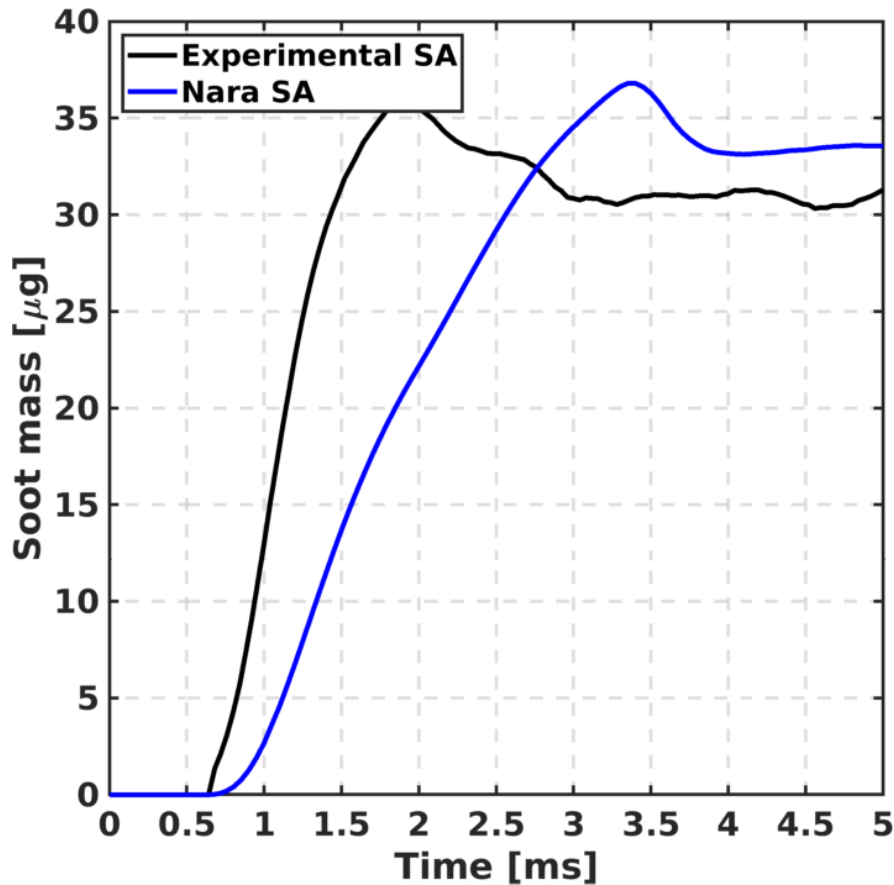


Figura 4.6 Evolución de la masa de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Gokul en el Spray A nominal

Como se puede observar, existe un orden de magnitud similar en cuanto al máximo y a los valores estabilizados para el hollín, con una diferencia del 4% y el 6% respectivamente. Sin embargo, el máximo de la simulación se encuentra retrasado temporalmente del máximo de lo observado en la experimentación.

El inicio de la formación del mismo se encuentra también con un decalaje similar. Éste puede tener su origen en el hecho de que existe un mayor ID en el caso simulado con respecto al experimento, ya que, al retrasar el autoencendido,

se retrasa también la aparición de los precursores del hollín, y por tanto el inicio de la formación de éste.

En cuanto al decalaje del máximo obtenido, se ve que se trata de un retraso aún mayor que el provocado por la diferencia en el ID, ya que se observa además un progreso más lento de formación de hollín, este progreso podría estar influenciado tanto por la formación físico-química del hollín, como por el avance de la llama dentro de la región de interés delimitada.

#### 4.2.5 Fracción volumétrica de hollín

Para tener una visión más general del problema representamos valores de la fracción volumétrica de hollín con distribución espacial (Figura 4.7), es decir, con valores en función de la posición en el eje del chorro, en el último instante de la simulación, cuando la llama es cuasi-estacionaria.

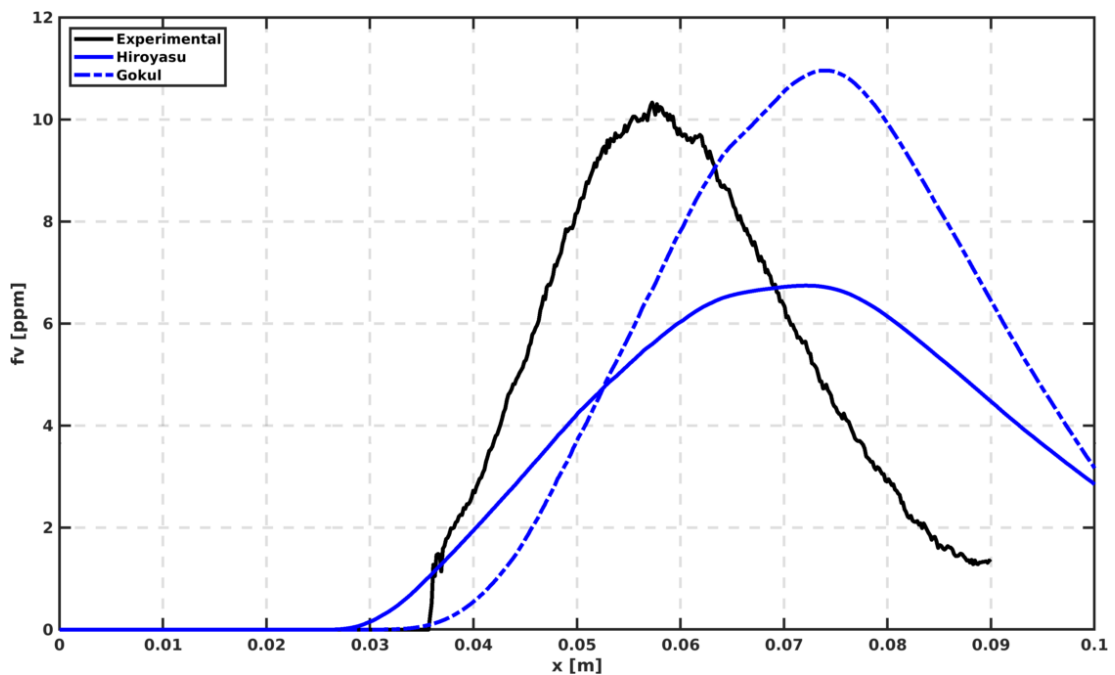


Figura 4.7 Distribución espacial de la fracción volumétrica de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Gokul e Hiroyasu-NSC calibrado en el Spray A nominal

La información principal de esta gráfica comparada con las anteriores, es que, si bien el modelo empírico calibrado da buenos resultados en cuanto a la masa de hollín formada, no se consigue que se escale convenientemente en términos de fracción volumétrica. La fracción volumétrica máxima en el caso del

modelo fenomenológico es apenas un 7% superior, mientras que en el caso del modelo empírico el valor es más de un 30% menor.

En ella se puede observar que la producción de hollín en la simulación se produce aguas abajo de la producción vista en los ensayos, por esa razón aparece más tarde, disminuyendo la pendiente de la Figura 4.6 para los valores de la simulación. Esto es, siendo la progresión del chorro similar en términos de penetración, la producción de hollín se produce antes para el caso experimental que para el caso simulado.

Las diferentes razones que podrían corregir esta situación son la diferencia del LOL, ya que éste hace que la zona reactiva de la simulación se encuentre más alejada de la tobera que en el ensayo experimental, lo cual está relacionado principalmente con el mecanismo de combustión elegido [22]. Otra de las razones, podría ser la del hecho de que el hollín se distribuye de manera diferente a lo largo de la llama. Esta diferencia de posiciones en el hollín es la que finalmente provocaría que la subida y bajada del hollín a lo largo del eje no estuviesen acordes.

A pesar de todo ello, en términos de valores generales para los ensayos y simulaciones, los valores de masa formada y fracción volumétrica alcanzan valores similares para los dos modelos. Esto ocurre tanto como para los máximos obtenidos como para los valores estabilizados.

Para la determinación de las diferencias en cuanto a acumulación de hollín en términos de valores en el eje, es necesario la observación de los valores espaciales de los datos de hollín formado, fijándonos en la distribución espacial del hollín en el intervalo en el que se ha estabilizado el problema. Inicialmente, observando la penetración del chorro, no se puede determinar como la razón que la llama vaya muy retrasada como para cambiar el máximo de masa de hollín. La razón debe de estar en diferencias en la distribución del hollín a lo largo de la llama.



#### **4.2.6 Distribución espacial del hollín**

A continuación, se van a analizar las imágenes de fracción volumétrica del hollín, cuyos datos a cada altura del eje se han presentado en el apartado anterior.

Las imágenes que se presentan son las del caso experimental del Spray A nominal, junto con las imágenes de la simulación de dicho caso con el modelo empírico y el fenomenológico. En el caso de las medidas experimentales estas imágenes se han obtenido mediante técnicas ópticas que no se discuten en este trabajo. En cuanto a las simulaciones la imagen, se ha obtenido promediando los datos de 25 planos secantes a lo largo del eje, separados equitativamente a lo largo de 360 grados. De esta manera se obtiene el campo en 2 dimensiones, y posteriormente se ha representado el semiplano final conseguido.

En estas imágenes se puede apreciar que el hollín formado se acumula en una zona más cercana a la tobera en el caso de la llama experimental. También se observa que la zona en la que se comienza a formar el hollín es más similar para el modelo fenomenológico, pero esta tiene una distribución de la zona con hollín más gradual hasta que llega al máximo. Esto se sostiene por que el máximo alcanzado tiene una diferencia espacial mayor a la diferencia en el *lift-off length*, siendo la diferencia en el LOL de unos 10 mm y la diferencia espacial entre los máximos de fracción volumétrica de más de 15 mm. En el caso de las diferencias con el modelo empírico, el máximo se sitúa aproximadamente en el mismo punto que en el otro modelo, aunque comienza a formar hollín ligeramente antes que en el caso experimental.

El extremo al que llega la fracción volumétrica de hollín es el más pequeño para el caso experimental, algo mayor para el modelo *Gokul*, y el mayor para el *Hiroyasu-NSC*.

En las imágenes presentadas pertenecientes a las simulaciones se presenta además donde se encuentra la superficie con el límite del chorro (línea continua), la superficie estequiométrica (línea discontinua), y la posición del LOL (asterisco).

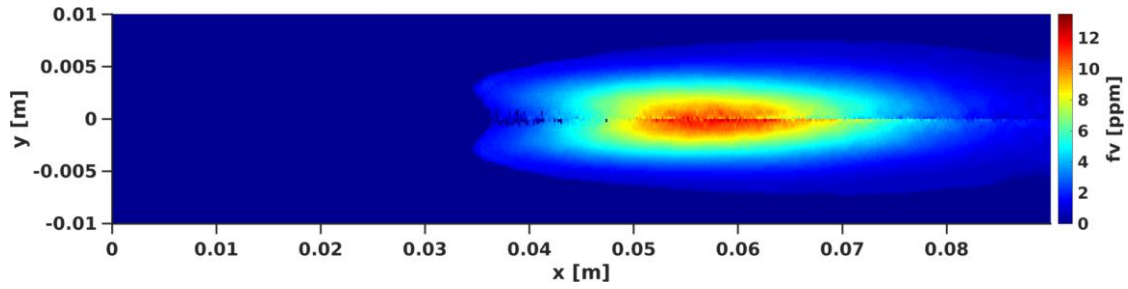


Figura 4.8 Valores de la fracción volumétrica de hollín en el ensayo experimental del Spray A nominal durante la llama en estado cuasi-estacionario

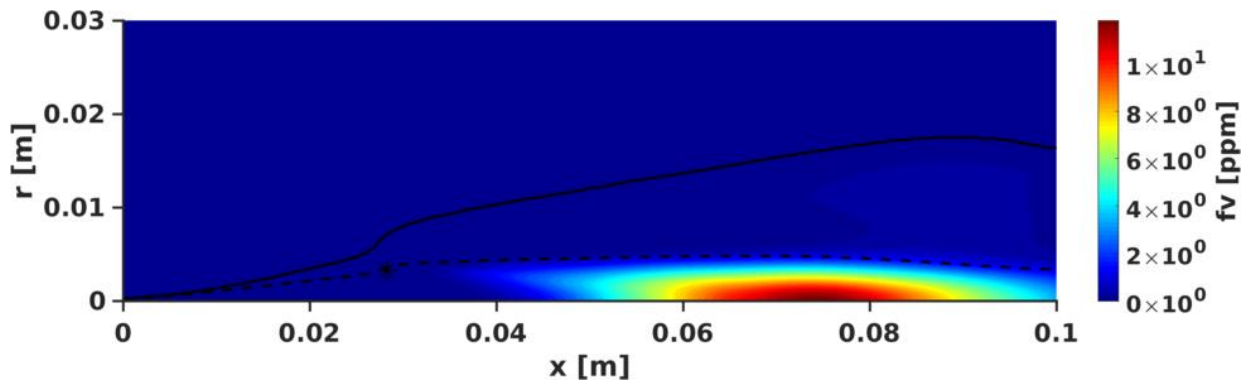


Figura 4.9 Valores de la fracción volumétrica de hollín obtenidos con el modelo Gokul para el Spray A nominal, durante la llama en estado cuasi-estacionario

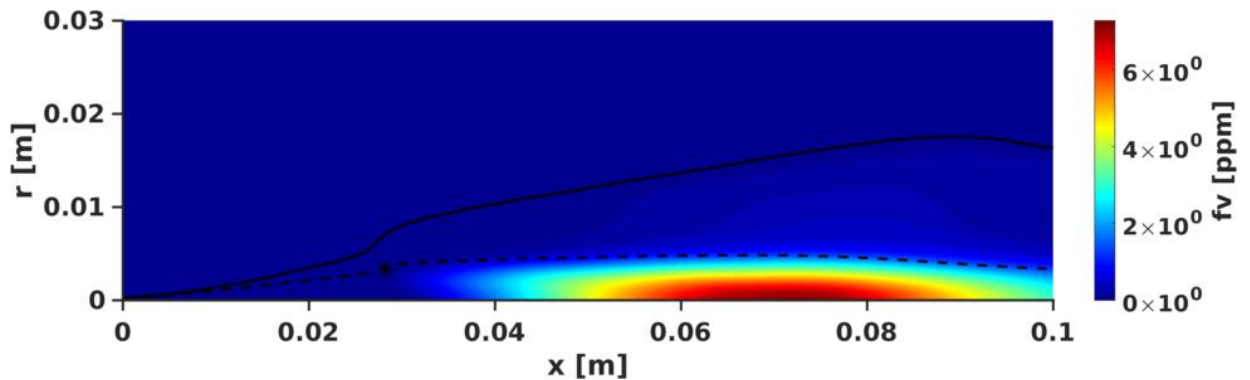


Figura 4.10 Valores de la fracción volumétrica de hollín obtenidos con el modelo Hiroyasu-NSC para el Spray A nominal, durante la llama en estado cuasi-estacionario

Con estas imágenes se puede determinar que, la razón por la que no existe equivalencia entre los valores de las fracciones volumétricas para los diferentes modelos, es la distribución espacial que tiene el hollín en cada uno de ellos. Siendo más parecida en los casos experimental y modelado con *Gokul*, teniendo una distribución similar, pero con decalaje a lo largo de la llama, y siendo más diferente en el caso modelado con *Hiroyasu-NSC*, donde la concentración de hollín tiene un valor siempre una escala menor, pero ocupa una región más grande.

La diferencia en esta distribución del hollín a lo largo de la llama según el modelo utilizado, tiene su origen en el precursor utilizado para la formación según el modelo. Según se puede apreciar en las imágenes de los precursores de ambos modelos para la llama en estado cuasi-estacionario, el precursor del modelo empírico, el acetileno (Figura 4.11), se distribuye desde inmediatamente después del punto en el que se encuentra el *lift-off*, mientras que el pireno, el precursor del modelo fenomenológico (Figura 4.13), se encuentra más centrado en la llama. Aun así, en el caso del modelo fenomenológico se extiende aún más que lo visto en la imagen del pireno, debido a que su crecimiento está asociado al acetileno, aumentando el tamaño de la región que ocupa el hollín calculado de esta manera.

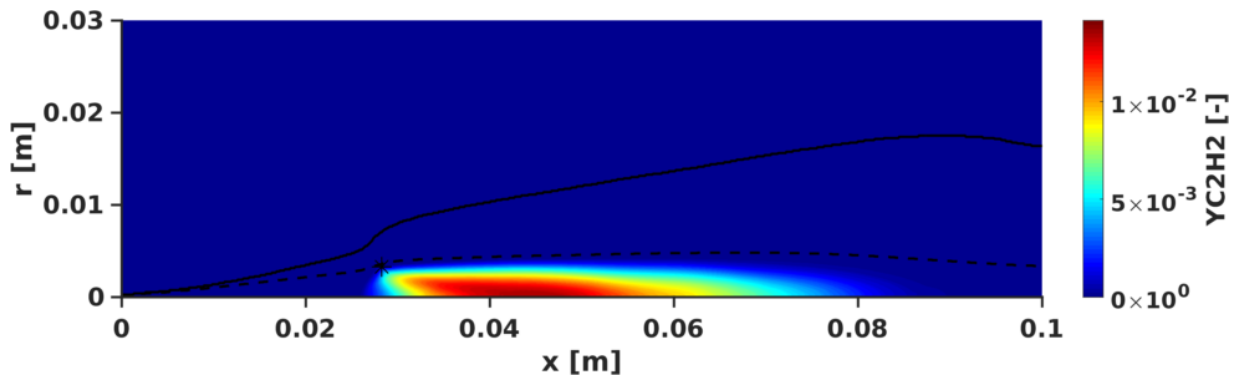


Figura 4.11 Valores de la fracción másica de acetileno para el Spray A nominal, durante la llama en estado cuasi-estacionario

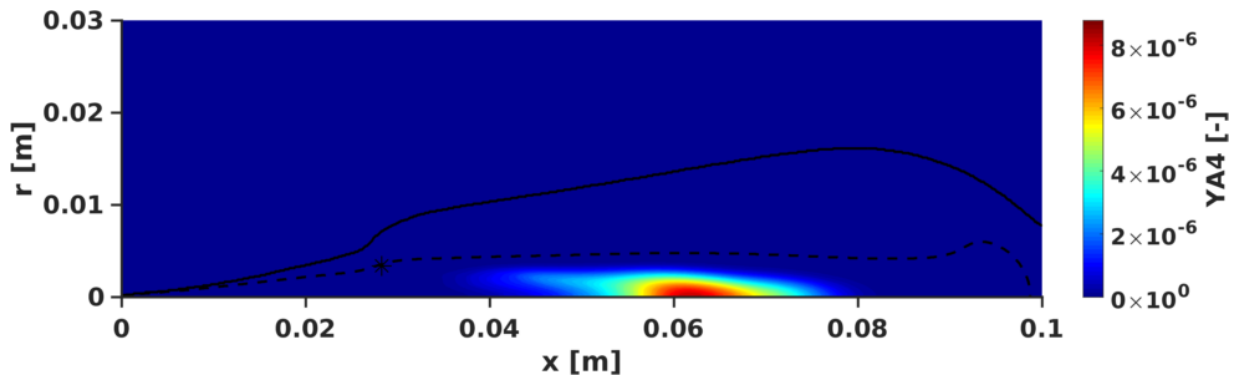


Figura 4.12 Valores de la fracción másica de pireno para el Spray A nominal, durante la llama en estado cuasi-estacionario

### 4.3 Variaciones en las condiciones de operación

El modelo da valores satisfactorios en cuanto a valores generales obtenidos, si bien la distribución espacio-temporal cuenta con diferencias. Para el diseño de motores sigue siendo útil la información recogida por el modelo para determinar la producción de hollín durante el proceso representado.

El siguiente paso es variar las condiciones termodinámicas de manera significativa, cambiando la temperatura y la concentración de oxígeno para tener un caso más reactivo y otro menos reactivo. Se hace para estudiar la capacidad predictiva del modelo al provocar variaciones en este sentido, y así comprobar su validez como herramienta de diseño.

La geometría y las condiciones de inyección son las mismas que para el caso anterior, estando especificadas en las tablas 3.1 y 4.1, pero ahora se cuenta con dos nuevos casos con las condiciones termodinámicas definidas en las siguientes tablas.

*Tabla 4.2 Condiciones termodinámicas del caso 800-15*

Temperatura ambiente	800 K
Densidad ambiente	22.8 kg/m <sup>3</sup>
Fracción volumétrica de oxígeno	$X_{O_2} = 0.15$

*Tabla 4.3 Condiciones termodinámicas del caso 900-21*

Temperatura ambiente	900 K
Densidad ambiente	22.8 kg/m <sup>3</sup>
Fracción volumétrica de oxígeno	$X_{O_2} = 0.21$

El análisis se realiza de la misma manera que en el caso anterior, habiendo hecho los cálculos del caso con los mismos modelos descritos que para el caso anterior, cambiando únicamente las condiciones previamente descritas.

### 4.3.1 Ignition Delay

El ignition delay, al ser un parámetro general de la combustión, permitirá conocer si existen diferencias entre las distintas simulaciones en este aspecto, para tener un conocimiento más extenso de las diferencias en cuanto a la combustión.

En la siguiente figura se representa el ignition delay para cada uno de los casos no nominales comparados junto con el nominal, distribuyéndose de menos a más reactivo.

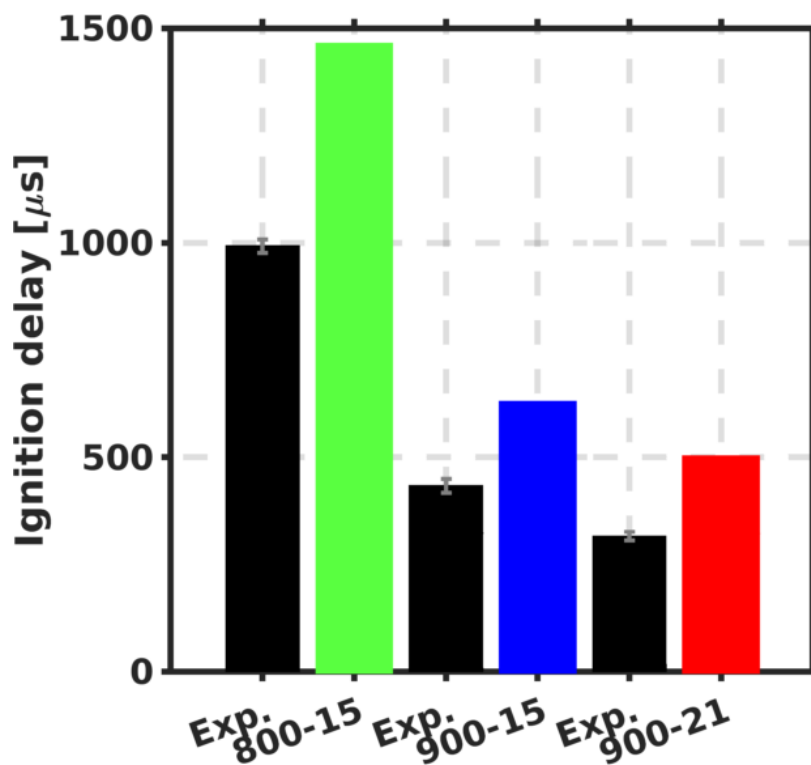


Figura 4.13 ID de los distintos casos del Spray A

Se comprueba que las simulaciones siguen la misma tendencia que la experimentación, disminuyendo el valor del ID cuanto mayor es la reactividad.

En este gráfico se observa que el ignition delay tiene unas diferencias acordes para cada caso, siendo menores cuanto menor es el valor experimental.

Porcentualmente se mantienen siempre en el mismo rango de retraso respecto a los valores obtenidos en los ensayos.

En los demás casos nos encontramos en la misma situación en la que el ID ocurre con un retraso en los casos simulados respecto a los ensayados.

### 4.3.2 Lift-off Length

Este parámetro tiene una especial importancia, ya que la posición en la que se estabiliza la llama tiene influencia la aparición de más o menos hollín en la simulación, ya que, como se ha explicado anteriormente el dosado alrededor de esta zona es determinante en términos de producción del hollín. En la Figura 4.14 se comparan los tres casos del Spray A.

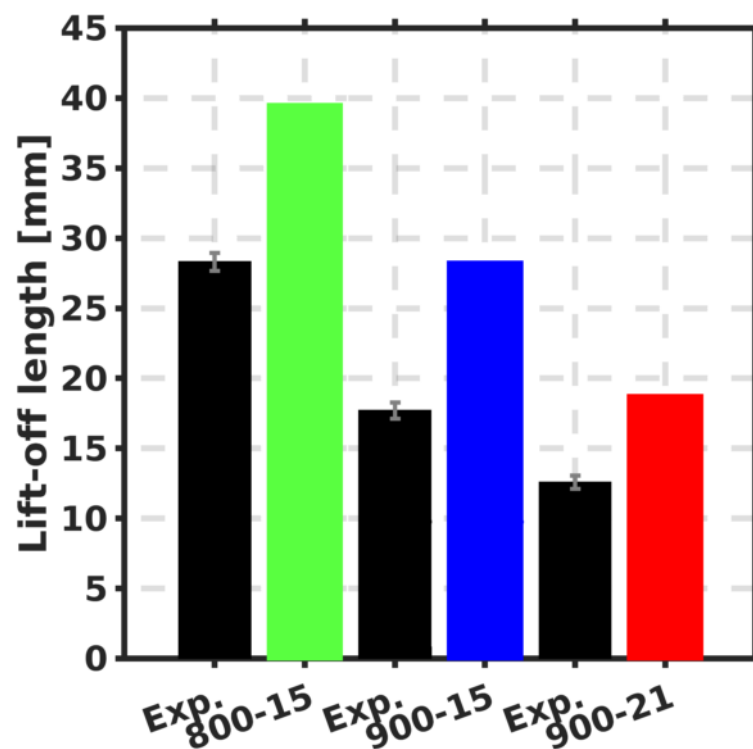


Figura 4.14 LOL de los distintos casos del Spray A

En este caso se ve que para todas las condiciones simuladas se cuenta con una diferencia proporcional muy similar, estabilizándose el LOL siempre aguas abajo respecto a los casos experimentales. Como se ha dicho antes, las diferencias

en este parámetro están relacionadas sobre todo con el modelo de combustión utilizado en las simulaciones, que en los tres casos ha sido el mismo.

Para el cálculo del LOL, es necesario realizar un promediado a lo largo de un intervalo temporal en el que se suponga que la llama se encuentra estabilizada. Al contar con tres casos diferentes, es necesario comprobar que los valores usados para el LOL se encuentran efectivamente dentro de una zona aceptablemente estabilizada de la simulación. Esto se hace porque no se tienen por qué estabilizar las llamas en los tres casos en la misma zona. Se representa el LOL instantáneo para los tres casos, junto con la zona en la que se realizó el promediado del valor, en la siguiente figura.

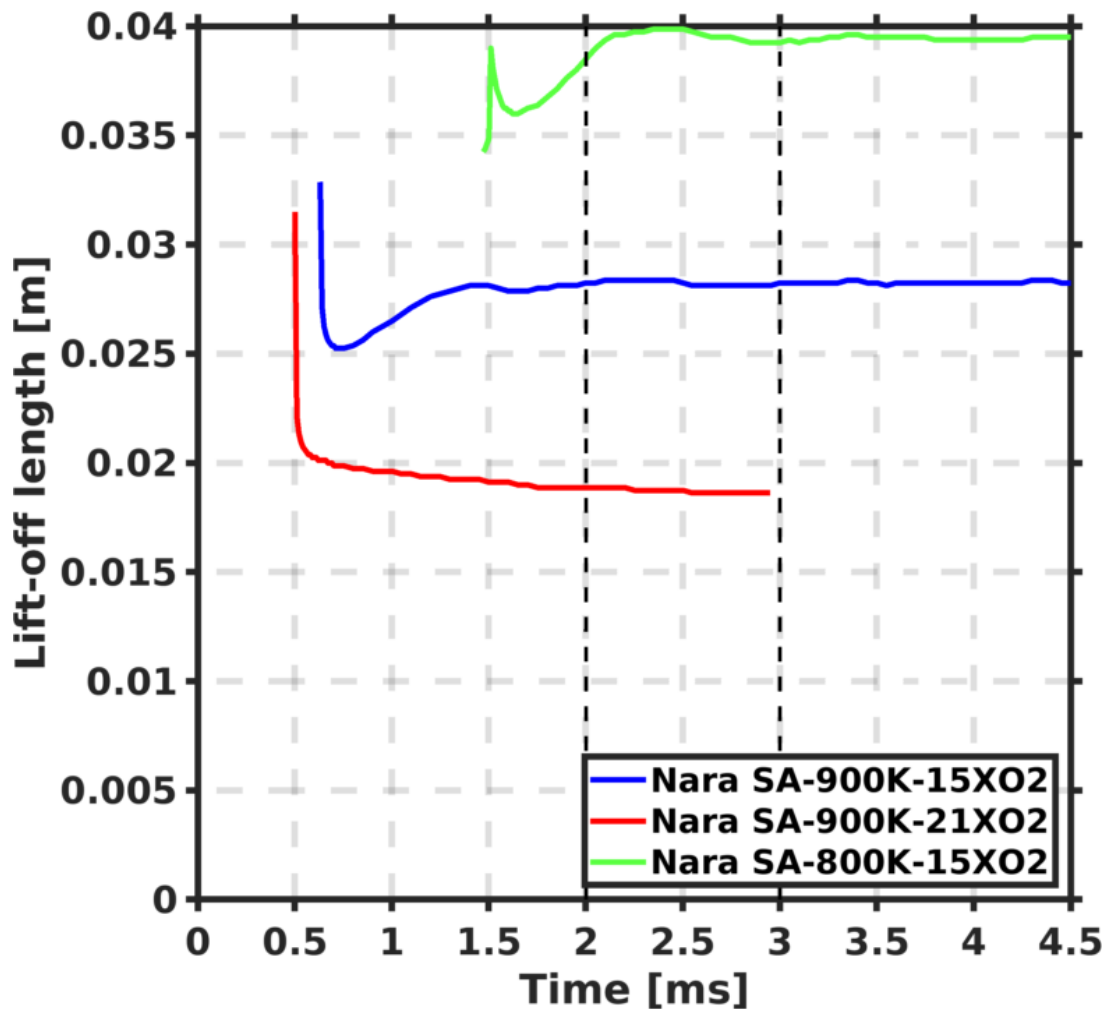


Figura 4.15 Evolución del LOL para los distintos casos del Spray A

Se puede observar que para los casos más reactivos el LOL se encuentra relativamente estabilizado dentro del intervalo de promediado, delimitado por

las líneas verticales discontinuas. Por otro lado, el caso menos reactivo oscila en dicho intervalo, pero al hacerlo alrededor del valor en el que más tarde se estabiliza, se puede considerar válido el valor promediado.

En cuanto a los resultados generales, tanto de los ensayos como de las simulaciones, se tiene que cuanto mejores condiciones se dan para la reacción, menores valores se tienen tanto como para el ID como para el LOL. Esto sucede ya que debido a que con una mayor temperatura se aumenta la reactividad. Por otro lado, al contar con más oxígeno en el medio, se debe recorrer menos espacio para englobar el aire necesario para iniciar la reacción.

### 4.3.3 Penetración del chorro

Nuevamente es necesario ver las posiciones relativas de los chorros ensayados y simulados para establecer diferencias que puedan explicar las diferencias en los valores espaciales obtenidos, con los consiguientes errores traspasados a los valores temporales.

En el siguiente gráfico (Figura 4.16) se ve la penetración del chorro en los tres casos, para poder apreciar las posibles diferencias según el caso.

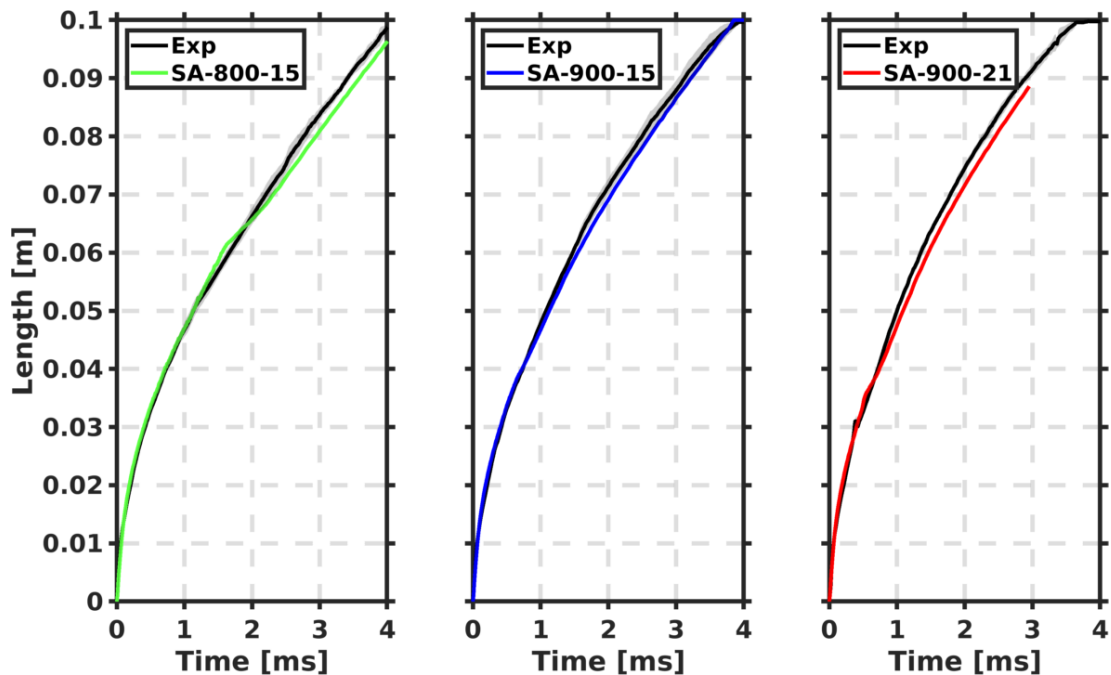


Figura 4.16 Penetración del chorro de los distintos casos del Spray A



En los tres casos la simulación tiende a quedarse algo retrasada respecto a los ensayos. Aunque la diferencia en el *ignition delay* provoque un retraso en la aceleración del chorro debido al inicio de la combustión, este queda bastante ajustado respecto a los ensayos.

#### **4.3.4 Masa de hollín**

El conjunto de parámetros vistos hace referencia al proceso de inyección y combustión, cuando no es la estabilidad de los modelos de estos fenómenos la que se está estudiando. Si bien se visualizan, es debido a que las diferencias en la simulación de estos parámetros pueden explicar diferencias referentes a lo visto en el hollín.

A continuación, seguimos con los resultados que son parte central de este trabajo, los referidos a la producción de hollín. En ese aspecto hay que resaltar un dato, y es que experimentalmente no se aprecia formación de hollín en el caso menos reactivo de todos, el caso a 800 K y con el 15 % en volumen de oxígeno en la cámara. La explicación de esto estaría relacionada con el aumento del *Lift-off length* debido a la falta de reactividad. La autoignición se producirá con más aire englobado y un dosado más pobre. Esta reacción, al no ser tan rica, no provocará tantos precursores del hollín que no han conseguido oxidarse en ese momento, por lo que el hollín formado llega a ser despreciable. En el caso de los ensayos experimentales no hay medidas del hollín. Debido a todo ello no se considera la formación de masa en los siguientes análisis.

Inicialmente representamos cual es la predicción del hollín formado usando el modelo *Hiroyasu-NSC* (Figura 4.17). Se ha usado para ambos el mismo factor para calibrar que el obtenido para el caso nominal, para estudiar si es extensible a otras condiciones, o por el contrario es necesario calibrar cada caso convenientemente para obtener valores válidos. Con ello se puede ver la capacidad predictiva sobre variaciones del caso calibrado.

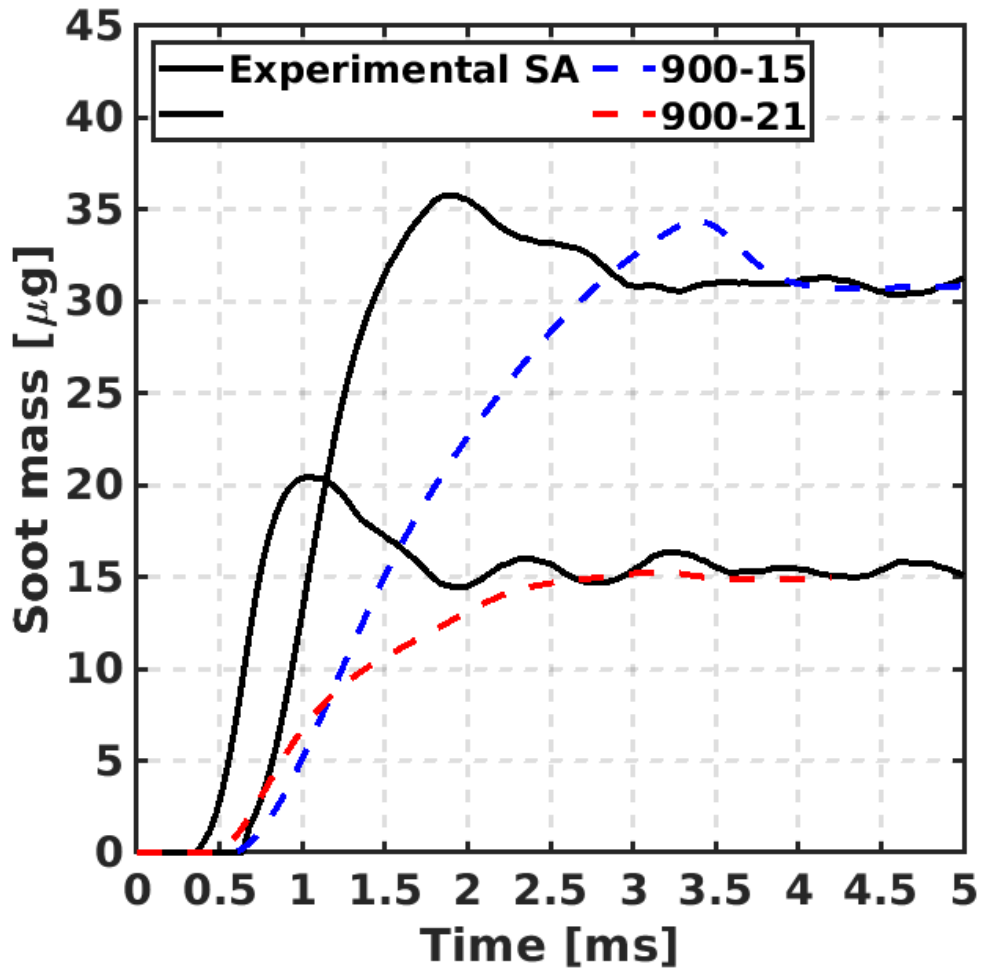


Figura 4.17 Evolución de la masa de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Hiroyasu-NSC, calibrado para el caso nominal, en los distintos casos del Spray A

La tendencia es acorde con los ensayos, en el sentido en el que la mejora de las condiciones de combustión y una disminución del dosado, provoque una menor producción de hollín. Los datos obtenidos además con las condiciones termodinámicas variadas, usando la misma escala que la obtenida con la calibración del caso nominal, tienen valores adecuados, por lo que la calibración del caso nominal es válida si se extiende a dichos casos. También se aprecia que el máximo del hollín formado se produce más tarde, lo cual indica que las constantes del hollín lo forman demasiado lento, como ya se podía apreciar en el uso de este modelo para el caso nominal.

No parece que haya una influencia en cuanto se alcanzan los máximos, o en los valores alcanzados, por parte de los cambios entre los casos simulados, por

lo que, se trata de un modelo estable con las variaciones de las condiciones termodinámicas.

El siguiente paso es el análisis de los resultados obtenidos según el modelo fenomenológico utilizado. El modelo se ha visto que, si bien de manera desacertada en el tiempo y en el espacio, da resultados aceptables en cuanto a máximos y a valores estabilizados. Ahora es necesario comprobar si la variación en los casos afecta a la aproximación de los resultados obtenidos mediante este modelo, por ello obtenemos estos valores en los mismos dos casos que en la gráfica anterior, quedando representados en la próxima figura.

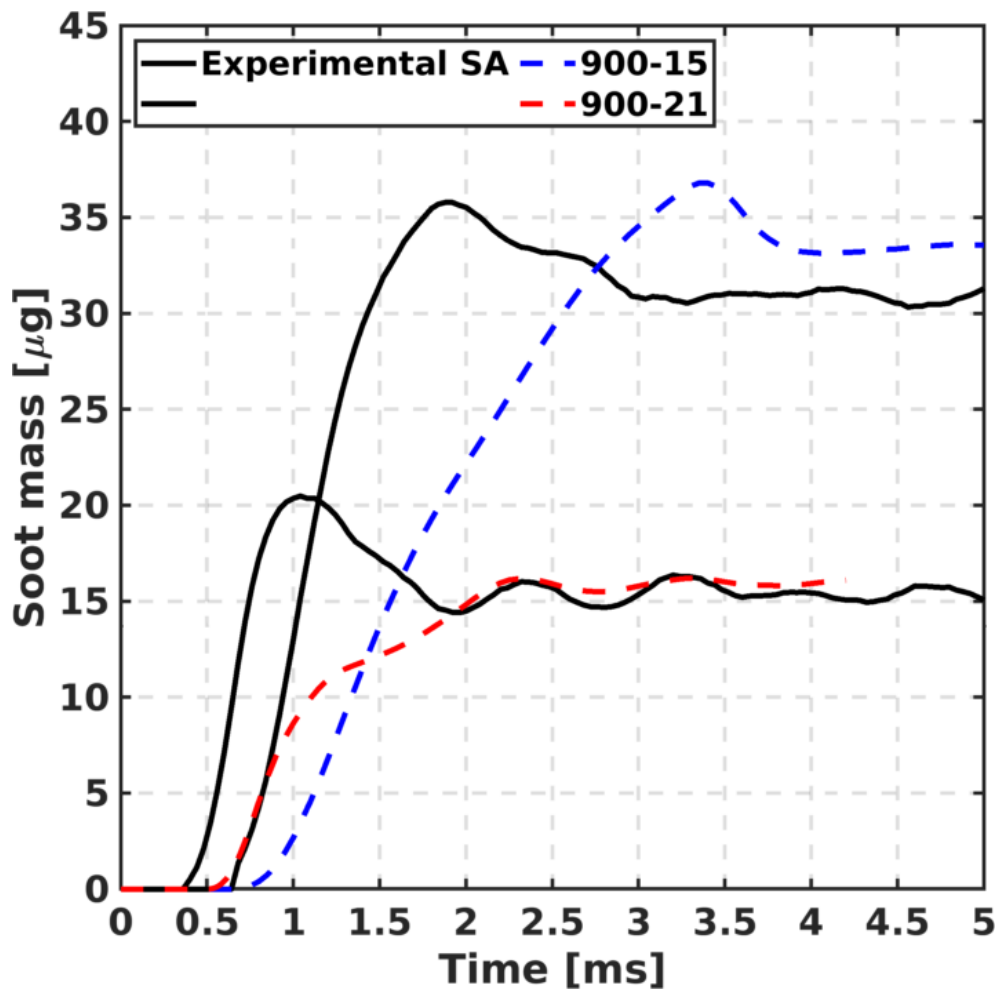


Figura 4.18 Evolución de la masa de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Gokul en los distintos casos del Spray A nominal

En el caso con mayor cantidad de oxígeno, se aprecia que los primeros instantes de formación del hollín, se producen con retraso respecto a la

experimentación, lo cual, podría explicarse debido al retraso del ID, de la misma forma que en el caso nominal. Sin embargo, se puede apreciar que la formación inicial se hace al mismo ritmo en el caso simulado y experimental del caso 900-21, lo cual se ve ya que en ese caso la inclinación es más similar que en el caso nominal. En este segundo caso, la formación parece ajustarse mejor inicialmente pero luego no alcanza el máximo de la misma manera que en el caso nominal. Por la forma del gráfico parece que en el segundo caso la oxidación cobra importancia antes, lo cual hace que no se alcance el máximo, pero por otro lado se ajuste mejor al valor estabilizado de la masa de hollín.

Nuevamente acudimos a la distribución de la fracción volumétrica de hollín a lo largo del eje para completar el análisis de lo aportado por estas gráficas.

#### **4.3.5 Fracción volumétrica de hollín**

Para la representación volumétrica de hollín se ha contado también con los resultados obtenidos para el caso 800-15, ya que, aunque no se cuenten con datos experimentales del mismo por lo explicado anteriormente, se podrá apreciar si existe algún tipo de sobreestimación por parte del modelo que pueda estar afectando igualmente a las medidas en los demás casos.

Estas medidas, obtenidas en el momento final de cada una de las simulaciones, no se corresponden para el mismo instante en todos los casos, pero siempre se considera que se ha alcanzado un estado cuasi-estacionario. En la gráfica de la Figura 4.15 se aprecia cual es el momento final de cada simulación representado en las gráficas representadas a continuación.

Aun así, la información recogida puede ser relevante para el análisis de las tendencias vistas en las gráficas sobre masa de hollín acumulada. Ya que la posición relativa en la que se encuentra el hollín, puede indicar diferencias en los tiempos y zonas en las que se está produciendo el hollín para cada caso. Las gráficas se representan en la Figura 4.19.

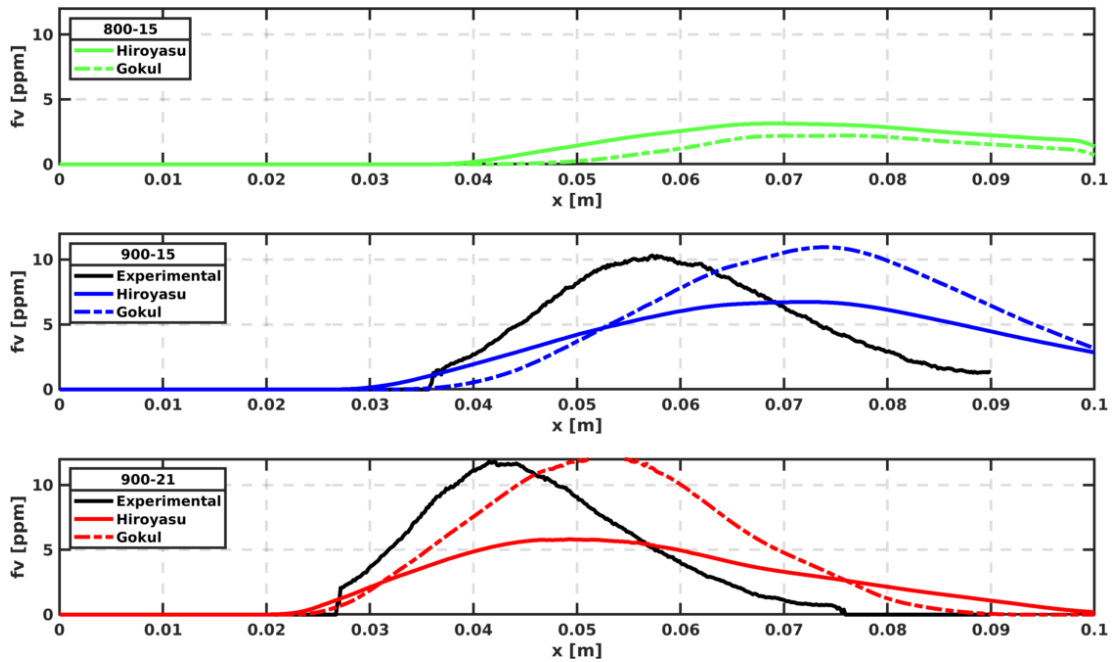


Figura 4.19 Distribución espacial de la fracción volumétrica de hollín de los datos CMT con el resultado del modelo Gokul y el Hiroyasu-NSC, calibrado para el caso nominal, en los distintos casos del Spray A. La de arriba del todo se corresponde con el caso menos reactivo, la central con el caso nominal, y la de abajo con el caso más reactivo.

Podemos observar que, en el caso menos reactivo, a pesar de no existir datos experimentales al tener una producción de hollín despreciable, sí que hay una pequeña producción prevista por el modelo, y lo simulado no es acorde a los datos obtenidos a partir de la experimentación. Pero, aun así, demuestra la coherencia del modelo indicando que, en condiciones más desfavorables para la producción del hollín, se tendrá una menor producción del mismo. En los otros dos casos las diferencias de los máximos obtenidos para el caso fenomenológico y la experimentación son poco significativas.

En cuanto a las diferencias por modelos, las tendencias se mantienen en los demás casos, con una distribución espacial mayor del hollín en el caso de los cálculos efectuados con el modelo empírico. Aunque se aprecia también que el modelo empírico sigue peor la tendencia de formación con la temperatura, al dar valores más altos que el modelo semi-empírico en el caso menos reactivo.

Como en el caso nominal, también se encuentra el hollín aguas abajo en el caso de la simulación en otras situaciones. Al observar el caso más reactivo, se observa que en el mismo las zonas con hollín se encuentran más cercanas a los

resultados experimentales, alejándose conforme se avanza en el eje. Esto es lo que provocaría que, inicialmente, el crecimiento del hollín en ese caso tuviese una tendencia parecida a la de la simulación, y luego presentase un crecimiento algo más lento.

Este acercamiento puede deberse a que, aunque en valor porcentual la diferencia entre el LOL del *900-21* y el resto de casos es muy similar, en términos absolutos se trata de un valor menor, por lo que al estar físicamente más cercanos ambos inicios del autoencendido, se tiene una distribución del hollín a lo largo de la llama más similar.

## 4.4 Variación en la geometría de la tobera

Tras estudiar la estabilidad del modelo cambiando las condiciones termodinámicas en los casos simulados, es necesario ver como afectarían cambios en la geometría de la tobera, usando en este caso la tobera propia del Spray D. En este caso se contará con las mismas condiciones termodinámicas que en el caso nominal, además de las mismas condiciones de inyección. Al mantener las condiciones de inyección, contando con una tobera diferente se tendrá un chorro de tamaño significativamente diferente, por lo que las condiciones geométricas íntegras de la simulación se cambian. Las nuevas condiciones geométricas se recogen en la siguiente tabla.

Tabla 4.4 Geometría del Spray D

Diámetro de la tobera	186 $\mu m$
Diámetro del cilindro	100 mm
Longitud del cilindro	141 mm

Esta tobera tiene un diámetro de aproximadamente el doble que en el caso del Spray A. Debido a que se tendrá la misma presión de inyección, el caudal inyectado será mayor que en el caso anterior.

Como en los casos precedentes, inicialmente se comienzan a comprobar los parámetros generales de la combustión.

### 4.4.1 Ignition Delay

En este caso el *ignition delay* tendrá diferencias notables, las cuales estarán relacionadas tanto con las diferencias en el flujo como con las diferencias en las condiciones en la zona de autoencendido.

Al estar en las mismas condiciones termodinámicas, se podría pensar que la reacción comienza con los mismos parámetros de mezcla. Esto no ocurre así, ya que antes de que se alcancen las mismas condiciones de mezcla en el caso del spray D, ya se producen unas condiciones suficientes para el inicio de la ignición.

La razón por la que se produce la ignición con peores condiciones está relacionada con el hecho de que la mezcla se produzca más lenta, ya que dicho autoencendido está vinculado, no solo a la fracción de mezcla y a la temperatura, sino que también lo está con el tiempo de residencia [22].

En las investigaciones llevadas a cabo por Desantes, García-Oliver, Novella y Pachano [22], se determina que un mayor diámetro de inyección implica un ratio de mezcla menor, lo cual provocaría el aumento del ID, debido a la relación entre mezcla temperatura y tiempo de residencia. En la figura Figura 4.20 se pueden observar dichos resultados.

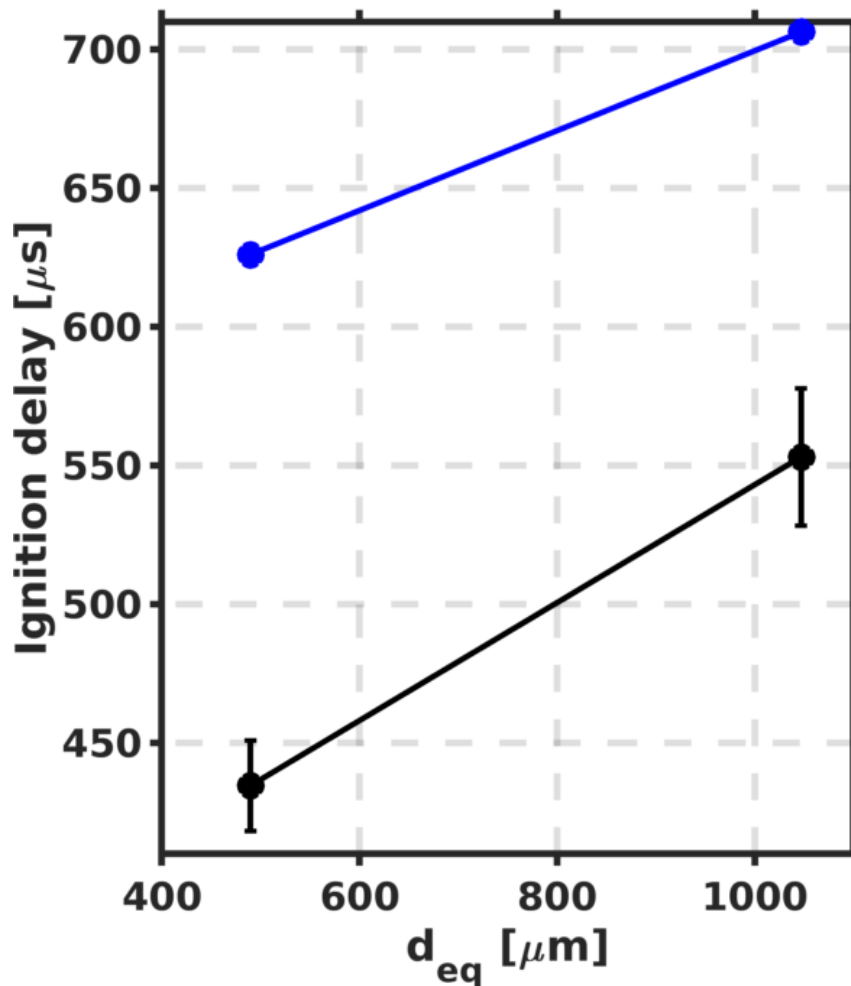


Figura 4.20 ID del caso nominal en Spray A/D

Los resultados son acordes a lo esperado, además la simulación se adapta a la nueva situación con valores con una diferencia similar al caso anterior.



#### 4.4.2 Lift-off length

Debido al mencionado menor ratio de mezcla es esperable que la llama se estabilice aguas abajo en el caso del Spray D. En el siguiente gráfico se comprueba (Figura 4.21).

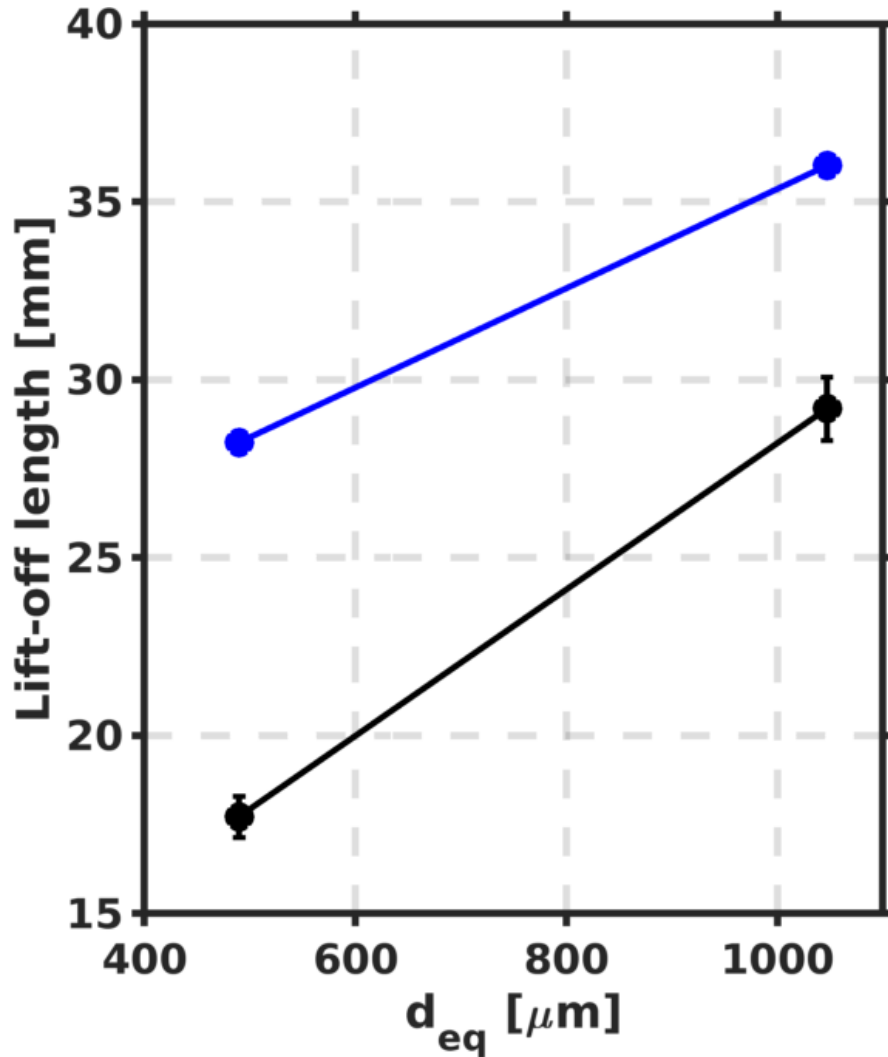


Figura 4.21 LOL del caso nominal en Spray A/D

El LOL se comporta de manera similar al ID, aunque debido a lo explicado en el apartado anterior este mayor Lift-off length no va a implicar una mayor mezcla aire-combustible, por lo que el dosado no va a empobrecerse con el aumento del LOL en este caso, como sí que ocurriría con un caso en el que se disminuyese la temperatura con la misma tobera.

### 4.4.3 Penetración del chorro

Una vez más es necesario controlar el valor de la penetración del spray, para tener en cuenta las posibles diferencias en las posiciones entre simulación y ensayos. Se representa en la siguiente figura.

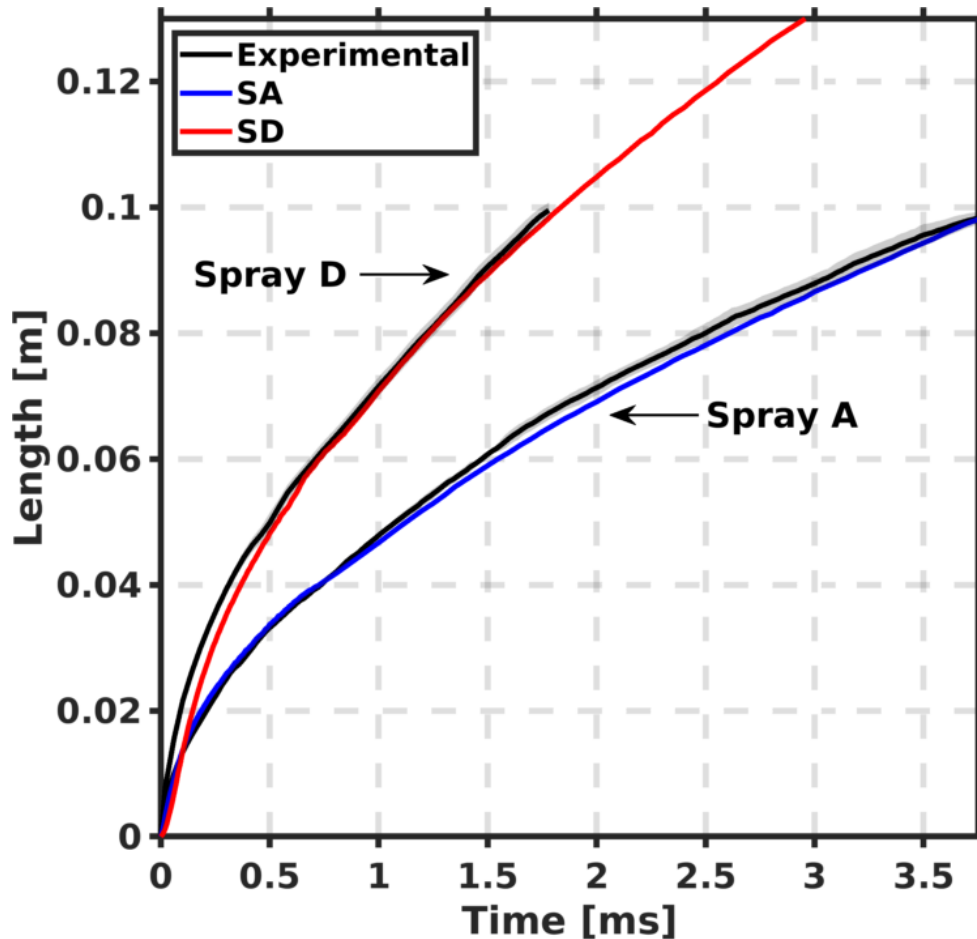


Figura 4.22 Penetración de chorro en el caso nominal del Spray A/D

El caso del Spray D se comporta de manera contraria al caso del Spray A, en el sentido de que el desajuste de la simulación ocurre durante la fase inerte de la simulación, ajustándose una vez que comienza la combustión.

### 4.4.4 Masa de hollín

Es procedente resaltar que en el caso del Spray D no se cuentan con datos experimentales obtenidos desde las instalaciones del CMT, si no que únicamente se tienen los datos disponibles en la web del ECN. Por ello, para apreciar las diferencias entre los dos casos, se contará también con los datos ECN para el

Spray A. Esto hará que se tenga una diferente región de interés a la hora de estudiar la masa de hollín formada, pudiéndose tener comportamientos diferentes en dicho parámetro que deberán ser explicados. Además, no se cuenta en este caso con valores experimentales para la fracción volumétrica de hollín.

Por lo tanto, la región de interés de las simulaciones cambia para este caso, para adaptarse a la ventana de visión de la instalación experimental. En este caso se trata de un parámetro más importante que en los resultados vistos anteriormente. En el caso de la región de interés de las instalaciones del CMT, ésta es lo suficientemente grande como para que todo el fenómeno quede recogido dentro de sus límites, por lo que los cambios en los valores del hollín están sometidos a las variaciones de sus procesos de formación y oxidación. En este caso en cambio la ventana no es lo suficientemente grande como para englobar toda la llama, por lo que la posición de ésta dentro de la región de interés puede hacer que parte de la llama no se esté teniendo en cuenta, condicionando las medidas del hollín.

Debido a ello será necesario tener en cuenta la posición de la llama con el tiempo para poder analizar convenientemente los resultados del hollín, los cuales vienen representados en la Figura 4.23 para el caso del modelo *Hiroyasu-NSC* nuevamente con las contantes calibradas para el caso nominal del Spray A.

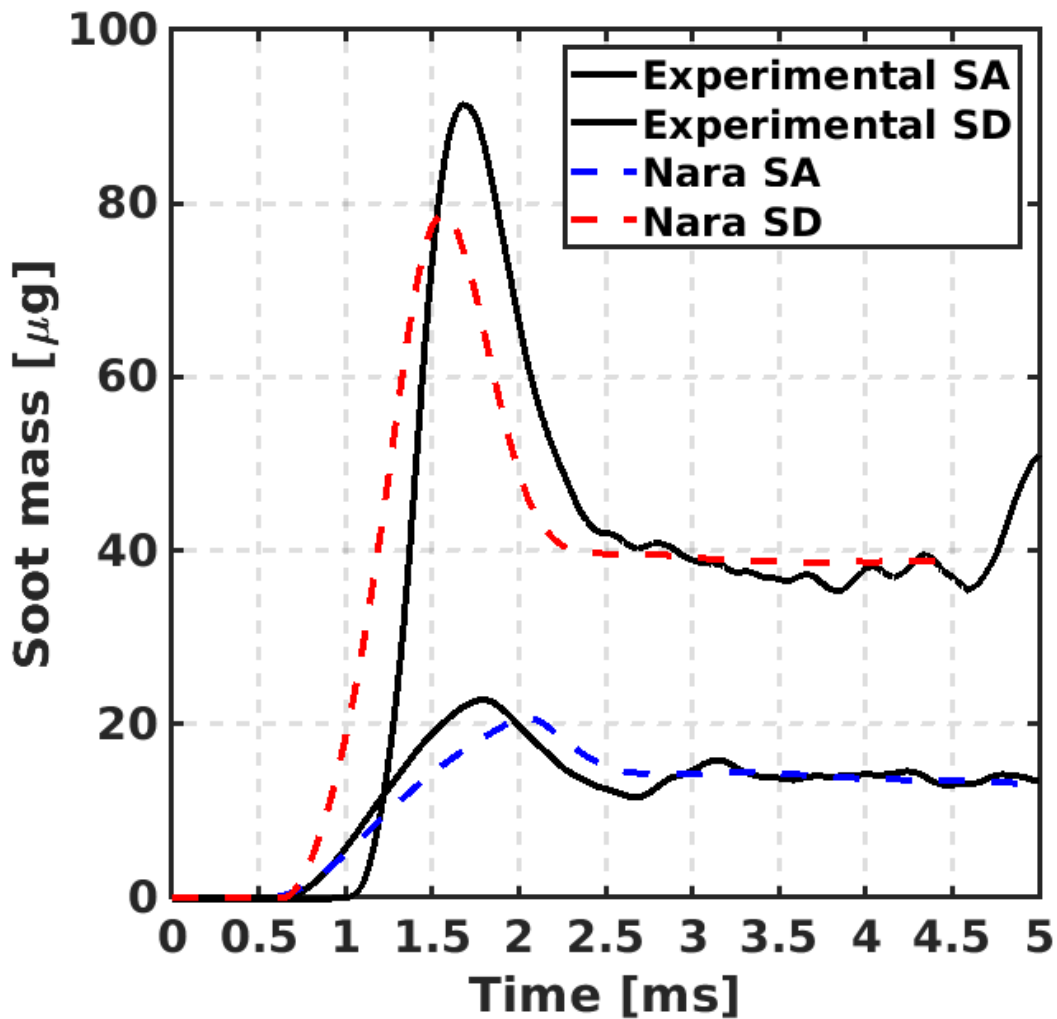


Figura 4.23 Evolución de la masa de hollín de los datos ECN con el resultado del modelo Hiroyasu-NSC, calibrado para el caso nominal del Spray A, para el caso nominal del Spray A/D

La simulación para el caso del Spray D da valores adecuados en el cuasi-estacionario con la calibración para el caso nominal del Spray A, por lo que no solamente es estable con las condiciones termodinámicas como se determina en el apartado anterior, sino que también lo es cambiando condiciones geométricas. Cabe decir que, a pesar de alcanzar valores adecuados para el intervalo estable de la combustión, no alcanza adecuadamente los valores en el máximo, quedándose con un valor un 11% menor.

A continuación, se continúa presentando los resultados de la simulación haciendo uso del modelo Gokul (Figura 4.24).

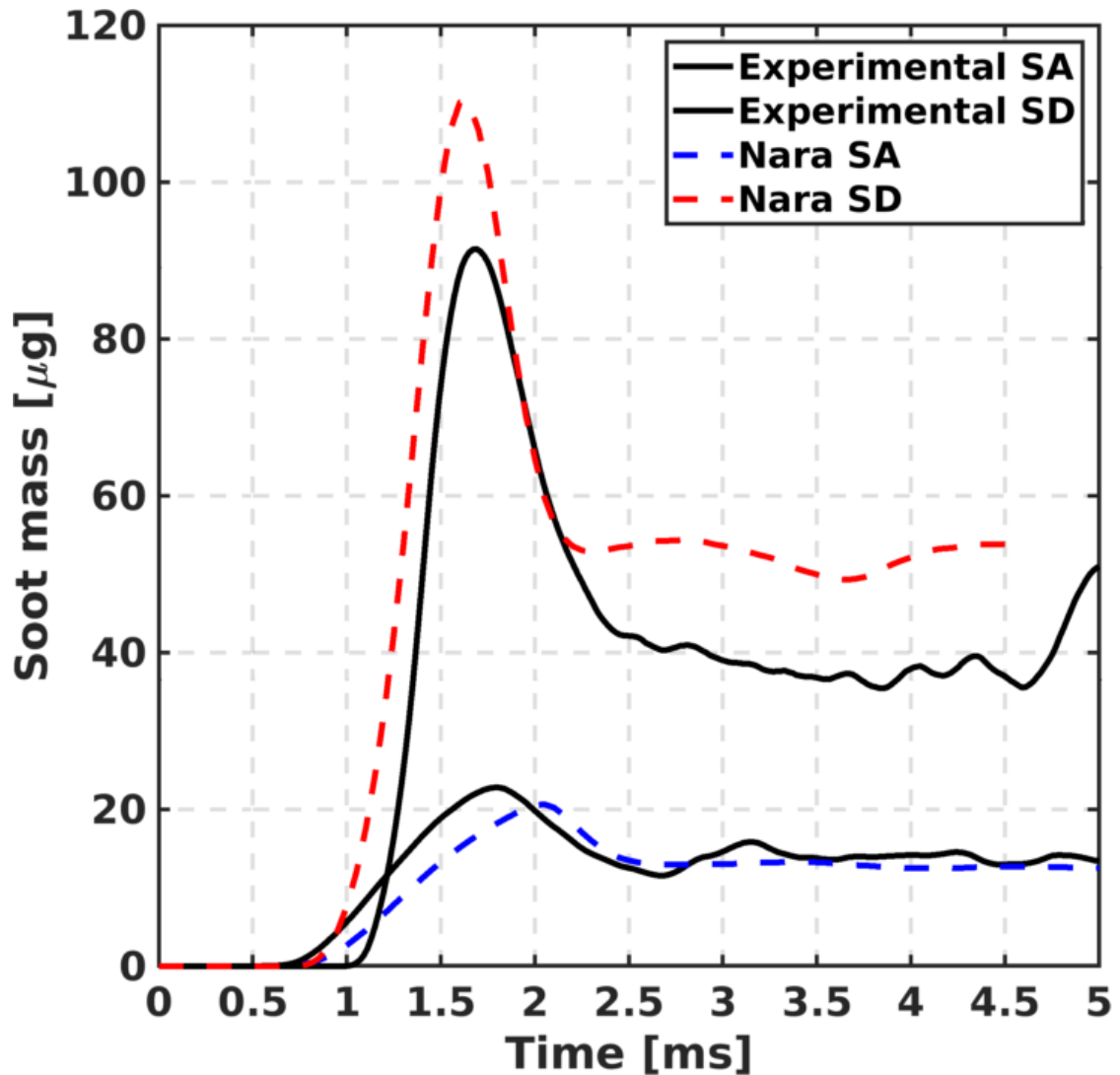


Figura 4.24 Evolución de la masa de hollín de los datos ECN con el resultado del modelo Gokul para el caso nominal del Spray A/D

En esta ocasión se ve un mayor ajuste en los resultados obtenidos para el Spray A, pero hay que tener en cuenta que en esta ocasión no se está viendo la llama completamente. En cuanto al Spray D, la simulación consigue seguir con cierto ajuste la formación del hollín, obteniéndose valores entorno a un 20% mayor respecto a los obtenidos experimentalmente. En este caso hay que resaltar la importancia de la región de interés.

La aparente aproximación de la consecución del instante del máximo no es debida al ajuste del modelo, sino al ajuste de penetración del chorro, ya que la razón de dicho máximo consiste en la salida del frente del chorro previo a la

estabilización del mismo, por lo que se trata de la salida de una región con gran cantidad de hollín que sale de la zona de la cual se recogen datos.

Esto se puede comprobar atendiendo a las gráficas del avance de la llama en la simulación en función del tiempo, y el instante en el que se encuentran al abandonar la región de interés.

La región de interés en el Spray D llega hasta los 0,088 metros, así que representamos el avance de ambos chorros hasta que el spray D alcance ese avance en el eje (Figura 4.25).

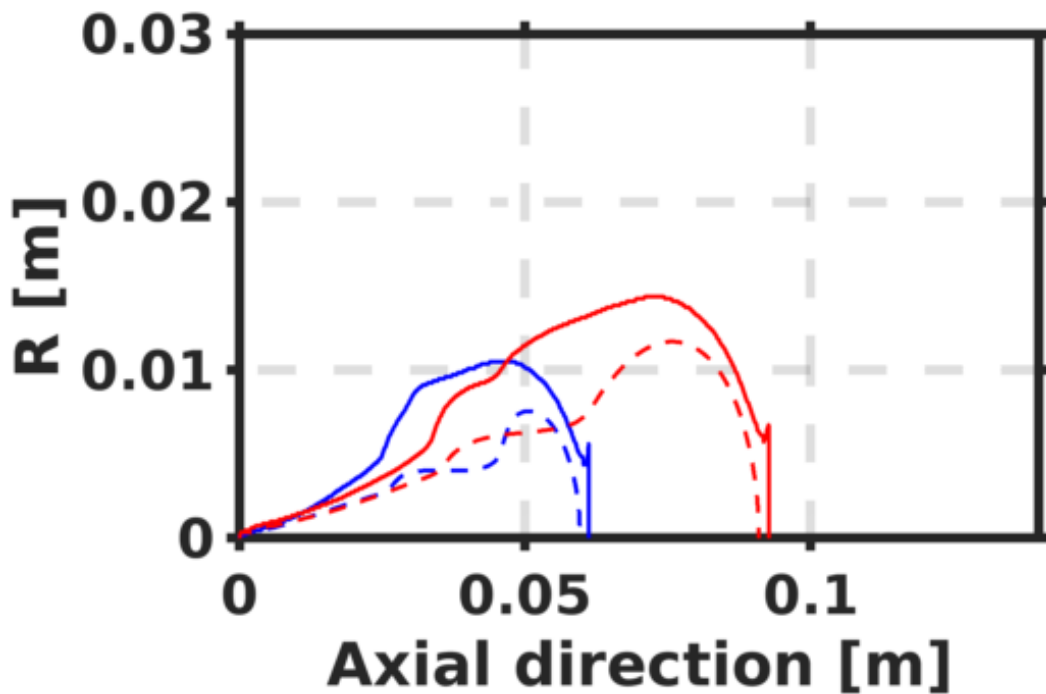


Figura 4.25 Avance de los chorros del Spray A/D para el instante 1,6 ms

Este avance se da en el instante 1.6 ms, lo cual se corresponde con el máximo de la masa de hollín visto en el spray D para la simulación.

Por otro lado, la región de interés del Spray A en este caso llega hasta los 0,07 metros. Representamos el momento en el que el Spray A llega a esa distancia (Figura 4.26).

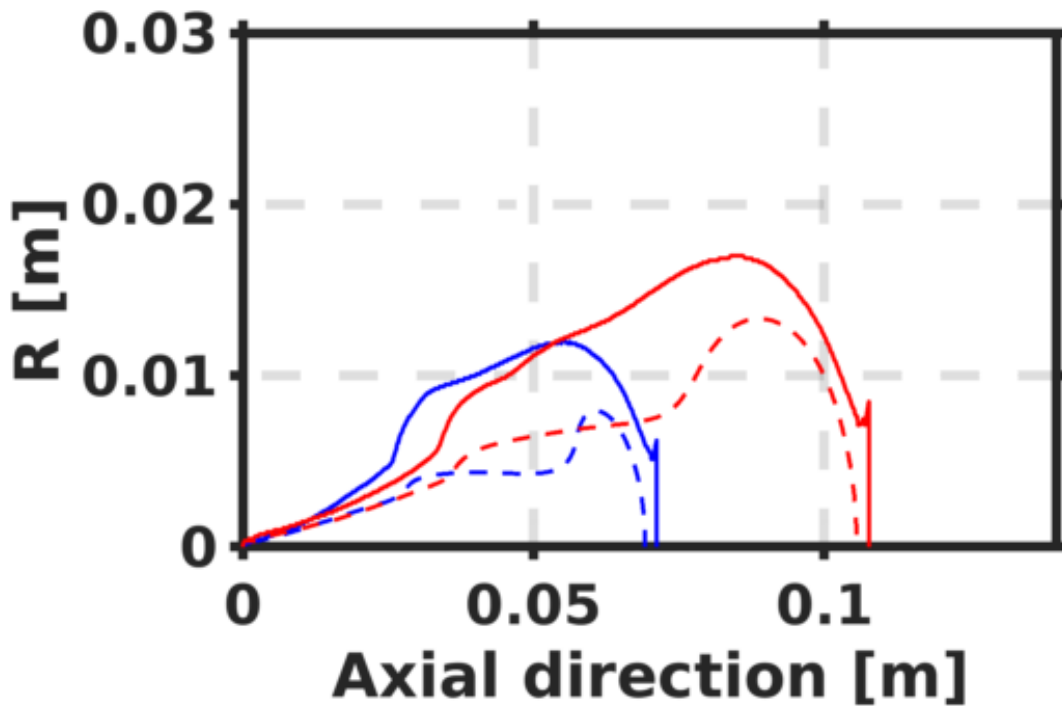


Figura 4.26 Avance de los chorros del Spray A/D para el instante 2,1 ms

Se puede observar que dicho avance se alcanza en el instante 2.1 ms, coincidiendo nuevamente el alcance del límite de la región de interés con el instante del máximo del hollín para la simulación.

Al comparar simulaciones y ensayos se puede determinar que la exactitud de alcance del máximo en términos temporales está relacionada con la exactitud en la penetración del chorro. En el caso del Spray D se encuentra muy próximo y, en la gráfica de la Figura 4.22, se puede observar que en el intervalo temporal en el que se produce el máximo la penetración del ensayo y de la simulación están muy próximas. Aun así, llama la atención que el máximo de la simulación se encuentre ligeramente más adelantado que en el caso experimental, cuando los chorros se encuentran muy próximos, y en todo caso, con el caso experimental ligeramente adelantado. La posible explicación a esto es que, dentro de la llama del caso experimental, la zona con más hollín se encuentre más retrasada en el interior de la llama, en comparación con el caso simulado que tendrá más hollín cuanto más se acerca a la punta de la llama. Esto sería consistente con los gráficos obtenidos de fracción volumétrica de hollín (Figura 4.7 y Figura 4.19) en los que

se observa que normalmente el hollín se encuentra en la zona más próxima a la punta de la llama en el caso de las simulaciones.

En el caso del Spray A se observa como en el intervalo entre 1,5 y 2.5 ms existe el mayor desajuste, estando el chorro experimental notablemente más adelantado, con el consiguiente adelanto del momento del máximo alcanzado, a pesar de que la zona con mayor cantidad de hollín se encuentre retrasada respecto a la de la simulación.

Ahora es necesario identificar el comportamiento de la formación y oxidación del hollín en las simulaciones. La formación en el caso del spray A es similar a la observada con la ventana del CMT, solo que con los valores más cercanos entre sí. También existe una menor diferencia en los ratios de crecimiento de ambos casos. Estas diferencias pueden estar influenciadas por dos causas. Por un lado, existe cierta incertidumbre de los datos obtenidos mediante la experimentación, ya que estos presentan una variabilidad no despreciable, como se observa en la Figura 4.27, donde diferentes ensayos en las mismas condiciones dan unos valores significativamente diferentes. Y en una mayor medida, las simplificaciones realizadas en el modelo pueden afectar a su capacidad predictiva en determinadas circunstancias. Todo ello puede dar lugar a la inducción de este tipo de errores. Con ello puede que no se esté teniendo en cuenta toda la cantidad de hollín realmente presente en el caso de los ensayos del Spray D.

Por ejemplo, en la Figura 4.18 representando los datos del CMT se observa que para el caso nominal, alrededor del instante 1.8 ms, previo a la salida del chorro de la región de interés del CMT, el ensayo tiene un valor de alrededor de 35  $\mu\text{g}$ . En cambio, en la Figura 4.24 representando los datos de la ECN se tiene un valor de alrededor de 22  $\mu\text{g}$ . Los valores en esas gráficas para el caso de la simulación en ese mismo instante son de algo menos de 20  $\mu\text{g}$  para ambos casos. También se observa que para los ensayos el valor de 15  $\mu\text{g}$  se alcanza en los datos CMT en el instante 1 ms, mientras que con los datos ECN se alcanza en el instante 1,25 ms. Por otro lado, en la simulación dicho valor se alcanza en ambos casos en el instante 1,5 ms.



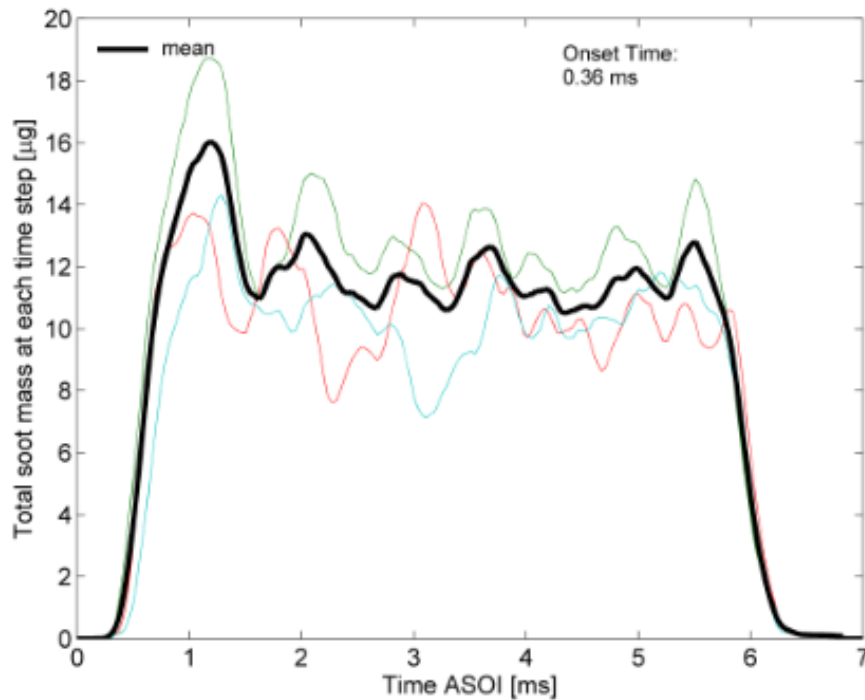


Figura 4.27 Valores de distintos ensayos del hollín del caso nominal del Spray A con n-dodecano obtenida en las instalaciones del laboratorio Sandia-ECN [23]

En el caso del Spray D, se tiene que los datos de la simulación dan un valor mayor tanto para el máximo como para el valor estabilizado. Para ello será necesario saber si se trata de una diferencia entre los valores provocados por los factores de formación y oxidación del hollín, o por el contrario se debe una diferencia inducida por la incertidumbre de los valores experimentales. Al no contar con la secuencia temporal de imágenes experimentales del Spray D no se puede comprobar.

# Capítulo 5

## Conclusiones y trabajos futuros

## **5.1 Introducción**

En este capítulo se resumen las conclusiones obtenidas de este trabajo, presentando los resultados obtenidos en los parámetros principales a determinar durante la realización de este trabajo. También, se presentan las ideas principales obtenidas a partir del análisis de los mismos. Finalmente, se comentan los posibles trabajos futuros que podrían realizarse para continuar con la validación de éstos y otros modelos de producción de hollín.

## 5.2 Conclusiones

A lo largo del trabajo realizado se han conseguido diferentes resultados que se han recogido y analizado para llegar a las siguientes conclusiones.

- El modelo *Hiroyasu-NSC*, una vez calibrado para el caso nominal del Spray A, también ha mostrado buenos resultados para la masa acumulada, con dichas constantes de formación y oxidación, para otros casos, cambiando condiciones termodinámicas y geométricas, especialmente en los valores relativos a la llama cuasi-estacionaria.
- Usando el modelo *Gokul* sin calibrar, se tienen buenos resultados en la masa acumulada para los distintos casos del Spray A, con errores de hasta el 6%. En el caso del Spray D, los errores son algo más significativos, ya que se obtienen valores de alrededor de un 20% superiores, aunque otros resultados hacen pensar que estas diferencias estén originadas en la incertidumbre de los valores obtenidos experimentalmente.
- En cuanto a la distribución espacial del hollín, representada con la fracción volumétrica, el *Hiroyasu-NSC* no consigue ajustarse a la experimentación, estando más extendido y menos concentrado. El *Gokul* en cambio consigue ajustarse mejor, aunque acumulándose aguas abajo respecto al caso experimental.

A pesar de los buenos resultados obtenidos en masa acumulada con el modelo empírico, el *Gokul* presenta valores igualmente satisfactorios sin la necesidad de haber sido calibrado, además de recoger mejor la distribución espacial del hollín y ser capaz de aportar datos relativos a la cantidad de partículas formadas.

## **5.3 Trabajos futuros**

Los futuros proyectos que se podrían realizar en esta línea de trabajo serían, partiendo de la información ya obtenida en este escrito:

- Extender los modelos a otras tipologías de chorros y combustibles incluidos en las bases de datos de la ECN para seguir comprobando su posible aplicación.
- Realizar estudios aplicando los modelos de simulación de hollín fenomenológicos en conjunción con modelos de combustión con la química tabulada, que reduzcan el coste computacional significativamente, y comparar los resultados obtenidos.
- Realizar estudios usando otros modelos fenomenológicos para comparar resultados y valorar la validez de las distintas aproximaciones y simplificaciones realizadas para desarrollar el modelo.
- Realizar estudios usando modelos detallados para profundizar en los fenómenos y subprocesos propios de la producción del hollín.

# Capítulo 6

## Bibliografía

- [1] European Commission, «Climate strategies and objecties. Mobility initiative», 2018.
- [2] E. J. Pérez-Sánchez, «Application of a flamelet-based combustion model to diesel-like reacting sprays», 2019.
- [3] J. M. Payri, F.; Desantes, *Motores de combustión interna alternativos*. Reverté, 2011.
- [4] Convergent Science, «CONVERGE Manual v2.4», p. 1008, 2017.
- [5] *Web de la Engine Combustion Network*. <https://ecn.sandia.gov/>, 2019.
- [6] J. M. García-Oliver, *Combustión y generación del calor. Apuntes de la asignatura*. 2019.
- [7] L. D. Zapata Pemberthy, «Caracterización de los Procesos de Inyección-Combustión Diesel Mediante Visualización y Procesado Digital de Imágenes», 2010.
- [8] J. M. García-Oliver, «Aportaciones al estudio del proceso de combustión turbulenta de chorros en motores diesel de inyección directa.», Universidad Politécnica de Valencia, 2004.
- [9] J. E. Dec, «A conceptual model of DI diesel combustion based on lasersheet imaging», *SAE Pap.*, vol. 970873, 1997.
- [10] K. Narayanaswamy, P. Pepiot, y H. Pitsch, «A chemical mechanism for low to high temperature oxidation of n-dodecane as a component of transportation fuel surrogates», *Combust. Flame*, vol. 161, n.º 4, pp. 866-884, abr. 2014.
- [11] I. M. Kennedy, «Models of soot formation and oxidation», *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 23, n.º 2, pp. 95-132, 1997.
- [12] R. A. Dobbins, R. A. Fletcher, y H. C. Chang, «The evolution of soot precursor particles in a diffusion flame», *Combust. Flame*, vol. 115, n.º 3, pp. 285-298, 1998.
- [13] H. Hiroyasu, T. Kadota, y M. Arai, «Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions», *Bull. JSME*, pp. 569-575, 1983.
- [14] J. Nagle y R. F. Strickland-Constable, «Oxidation of Carbon Between 1000-2000 Cº», en *Proceedings of the Fifth Carbon Conference*, 1962.

- [15] C. European Environment Agency, «Explaining road transport emissions: a non-technical guide», 2016.
- [16] G. Vishwanathan y R. D. Reitz, *Development of a practical soot modeling approach and its application to low-temperature diesel combustion*, vol. 182, n.º 8. 2010.
- [17] K. M. Leung, R. P. Lindstedt, y W. P. Jones, «A simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames», *Combust. Flame*, vol. 87, p. 289, 1991.
- [18] PubChem, «Pyrene | C16H10 - PubChem», 2015. [En línea]. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/31423#section=Top>.
- [19] C. P. Fenimore, «Oxidation of soot by hydroxyl radicals», *J. Phys. Chem.*, vol. 71, n.º 3, pp. 593-597, 1967.
- [20] M. E. Mueller, G. Blanquart, y H. Pitsch, «Modeling the oxidation-induced fragmentation of soot aggregates in laminar flames», *Proc. Combust. Inst.*, vol. 33, n.º 1, pp. 667-674, 2011.
- [21] K. G. Neoh, J. B. Howard, y A. F. Sarofim, «Effect of oxidation on the physical structure of soot», en *Proceeding of the Combustion Institute*, 1984, p. 957.
- [22] J. Desantes, J. M. García-Oliver, R. Novella, y L. Pachano, «A numerical study of the effect of nozzle diameter on Diesel combustion ignition and flame stabilization», *Int. J. Engine Res.*, 2019.
- [23] ECN, *Total soot mass experimental values*. [https://ecn.sandia.gov/data/akldndn\\_001\\_004soot/](https://ecn.sandia.gov/data/akldndn_001_004soot/), 2016.





**DOCUMENTO II**

**PRESUPUESTO**

# Capítulo 1

## Introducción

A continuación, se desarrolla el documento del presupuesto para el conjunto de trabajos desarrollados durante la realización de este proyecto. El presupuesto se ha estructurado iniciando con los precios unitarios desglosados por tipología. Se ha continuado con los precios descompuestos en función de unas unidades de obra definidas, y se ha finalizado presupuestando a partir de las mediciones correspondientes.

## Capítulo 2

### Cuadro de precios unitarios

MANO DE OBRA				
Código	Unidades	Descripción	Precio	Importe
MO.000	h	Servicios de un ingeniero titulado según la categoría profesional 1 del régimen general de la Seguridad social. Para el tutor y el director de proyecto se supone el 90% de la base máxima de cotización de la categoría.		
		Salario bruto mensual	3663,09	22,90
		Desempleo (5.5%)	201,47	1,26
		FOGASA (0,2%)	7,33	0,05
		FP (0.6%)	21,98	0,14
		Seguridad social (23.6%)	864,49	5,40
		<b>TOTAL</b>		<b>29,74</b>
MO.100	h	Servicios de un ingeniero titulado según la categoría profesional 1 del régimen general de la Seguridad social. Para el ingeniero encargado de realizar el proyecto se supone la base mínima de cotización de la categoría.		
		Salario bruto mensual	1466,40	9,17
		Desempleo (5.5%)	80,65	0,50
		FOGASA (0,2%)	2,93	0,02
		FP (0.6%)	8,80	0,06
		Seguridad social (23.6%)	346,07	2,16
		<b>TOTAL</b>		<b>11,91</b>

<b>MATERIAL, EQUIPOS Y LICENCIAS. AMORTIZACIÓN*</b>					
<b>Código</b>	<b>Unidades</b>	<b>Descripción</b>	<b>Precio</b>	<b>Amortización</b>	<b>Importe</b>
MEL.000	años	Ordenador Personal	1400	3	1400
				<b>TOTAL</b>	<b>1400</b>
MEL.100	años	Máquina de procesado	3000	3	3000
				<b>TOTAL</b>	<b>3000</b>
MEL.200	años	Estación de cálculo RIGEL	50000	5	50000
				<b>TOTAL</b>	<b>50000</b>
MEL.300	años	Licencia MATLAB	2000	1	2000
				<b>TOTAL</b>	<b>2000</b>
MEL.400	años	Licencia Converge	30000	1	30000
				<b>TOTAL</b>	<b>30000</b>

\*Se considera cada año de amortización de 220 días hábiles con 8h para el ordenador personal. Para las máquinas de procesado y cálculo, así como las licencias se usan todas las horas del año, al poder dejar funcionando actividades que las usen fuera del horario laboral.

<b>MATERIALES FUNGIBLES</b>				
<b>Código</b>	<b>Unidades</b>	<b>Descripción</b>	<b>Precio</b>	<b>Importe</b>
MF.000	h	Potencia consumida del ordenador personal con procesador de 150 W		
		Coste de consumo en kWh	0,14	0,02
			<b>TOTAL</b>	<b>0,02</b>
MF.100	h	Potencia consumida de la máquina de procesado con 32 procesadores de 150 W		
		Coste de consumo en kWh	0,14	0,90
			<b>TOTAL</b>	<b>0,90</b>
MF.200	h	Potencia consumida de la estación de cálculo RIGEL con 144 procesadores de 200 W		
		Coste de consumo en kWh	0,14	4,03
			<b>TOTAL</b>	<b>4,03</b>

## Capítulo 3

### Cuadro de precios descompuestos.

1 ACTUACIONES PREVIAS							
Código	Ud.	Descripción	% Uso	Cantidad	Precio	Importe	
1.01	Ud.	Preparación de los casos a simular. Se usa el software converge y el ordenador personal.					
MO.100	h	Ingeniero del proyecto	1,00	2,5	11,91	29,78	
MEL.000	a/a*	Ordenador personal	1,00	0,0005	1.400	0,70	
MEL.400	a/a	Converge	1,00	0,0003	30.000	9,00	
MF.000	h	Potencia consumida ordenador	1,00	2,5	0,02	0,05	
<b>Total partida</b>						<b>39,53</b>	
1.02	Ud.	Desarrollo de las rutinas de post-procesado. Se usa el software MATLAB y el ordenador personal.					
MO.100	h	Ingeniero del proyecto	1,00	30	11,91	357,30	
MEL.000	a/a	Ordenador personal	1,00	0,0057	1.400	7,98	
MEL.300	a/a	MATLAB	1,00	0,0034	2.000	6,80	
MF.000	h	Potencia consumida ordenador	1,00	30	0,02	0,60	
<b>Total partida</b>						<b>372,68</b>	

\* años usado respecto a años de amortización.

**2 SIMULACIÓN DE LOS CASOS**

Código	Ud.	Descripción	% Uso	Cantidad	Precio	Importe
2.01	Ud.	Cálculo de los casos preparados mediante el programa converge y la estación de cálculo RIGEL.				
MO.100	h	Ingeniero del proyecto	0,50	1	11,91	5,96
MEL.200	a/a	Estación de cálculo RIGEL	0,19	0,016	50.000	155,2
MEL.400	a/a	Converge	1,00	0,082	30.000	2.460
MF.200	h	Potencia consumida RIGEL	0,19	720	4,03	562,91
<b>Total partida</b>						<b>3184,07</b>

**3 POST-PROCESADO Y ANÁLISIS**

Código	Ud.	Descripción	% Uso	Cantidad	Precio	Importe
3.01	Ud.	Post-procesado de los casos a simular. Mediante las rutinas desarrolladas previamente y usando la máquina de post-procesado.				
MO.100	h	Ingeniero del proyecto	0,50	0,5	11,91	2,98
MEL.100	a/a	Máquina de post-procesado	0,38	0,0002	3.000	0,23
MEL.300	a/a	MATLAB	1,00	0,0005	2.000	1,00
MF.100	h	Potencia consumida máquina	0,38	4	0,9	1,37
<b>Total partida</b>						<b>5,58</b>
3.02	Ud.	Análisis de los resultados obtenidos. Discusión de los resultados y presentación a los interesados.				
MO.100	h	Ingeniero del proyecto	1,00	25	11,91	297,75
MO.200		Tutor o Director de proyecto	1,00	12,5	29,74	371,75
MEL.000	a/a	Ordenador personal	1,00	0,0047	1.400	6,63
MF.000	h	Potencia consumida ordenador	1,00	25	0,02	0,50
<b>Total partida</b>						<b>676,63</b>



## Capítulo 4

### Presupuesto y mediciones

#### 1 ACTUACIONES PREVIAS

Código	Ud.	Descripción	Cantidad	Precio	Importe
1.01	Ud.	Preparación de los casos a simular. Se usa el software converge y el ordenador personal.			
			4	39,53	
				<b>Subtotal</b>	<b>158,12</b>
1.02	Ud.	Desarrollo de las rutinas de post-procesado. Se usa el software MATLAB y el ordenador personal.			
			4	372,68	
				<b>Subtotal</b>	<b>1.490,74</b>
<b>COSTE TOTAL CAPITULO 1 ACTUACIONES PREVIAS = 1.648,84</b>					

#### 2 SIMULACIÓN DE LOS CASOS

Código	Ud.	Descripción	Cantidad	Precio	Importe
2.01	Ud.	Cálculo de los casos preparados mediante el programa converge y la estación de cálculo RIGEL.			
			4	3.184,07	
				<b>Subtotal</b>	<b>12.736,28</b>
<b>COSTE TOTAL CAPITULO 2 SIMULACIÓN DE LOS CASOS = 12.736,28</b>					

**3 POST-PROCESADO Y ANÁLISIS**

Código	Ud.	Descripción	Cantidad	Precio	Importe
3.01	Ud.	Post-procesado de los casos a simular. Mediante las rutinas desarrolladas previamente y usando la máquina de post-procesado.	4	5,58	
				<b>Subtotal</b>	<b>22,32</b>
3.02	Ud.	Análisis de los resultados obtenidos. Discusión de los resultados y presentación a los interesados.	4	676,63	
				<b>Subtotal</b>	<b>2706,52</b>

**COSTE TOTAL CAPITULO 3 POST-PROCESADO Y ANÁLISIS = 2.728,84**

## RESUMEN Y PRESUPUESTO TOTAL

Capítulo	Descripción	Importe
1	Actuaciones Previas	1.648,84
2	Simulación de los casos	12.736,28
3	Post-procesado y análisis	2.728,84
<b>PEM</b>	<b>Presupuesto de ejecución material</b>	<b>17.113,96</b>

ASCIENDE EL PRESUPUESTO DE EJEUCIÓN MATERIAL DEL PROYECTO A LA CANTIDAD DE DIECISIETE MIL CIENTO TRECE EUROS CON NOVENTA Y SEIS CÉNTIMOS (17.113,96 €)

Gastos generales (13,00% s/PEM) = 2.224,81

Beneficio Industrial (6,00% s/PEM) = 1026,84

<b>PEC</b>	<b>Presupuesto de ejecución por contrata</b>	<b>20.365,61</b>
	Impuesto sobre el valor añadido (21,00% IVA) = 4276,78	
<b>PT</b>	<b>Presupuesto total = 24.642,39</b>	

ASCIENDE EL PRESUPUESTO BASE DE LICITACIÓN DEL PROYECTO A LA CANTIDAD DE VEINTICUATRO MIL SEISCIENTOS CUARENTA Y DOS EUROS CON TREINTA Y NUEVE CÉNTIMOS (24.642,39€)